

## 摘 要

对半导体器件模拟分析软件进行设计与开发是一项很有意义的工作,不仅加快了器件的研制开发,节省了时间和资源,而且对实现计算机模拟分析软件的自主知识产权、提高我国器件开发的水平都有很重要的现实意义。本文在系统的描述了半导体器件模拟的理论基础与技术架构的基础上,应用当今流行的软件设计模式对器件模拟软件进行了系统的分析设计,提出了器件模拟的分布式计算的三个功能模块(参数输入模块、核心模拟模块、结果输出模块)的结构,并且对每个功能模块的构架与实现做了设计与分析。经过部分代码的编写,完成了可以实现基本功能的器件模拟软件的 DEMO 版本,对半导体器件的基本单元二极管进行了模拟,证明了本文的设计方案无论从理论上还是从实际操作上都是完全可行的一种方案。文章对我们设计的半导体器件模拟软件的接口以及功能扩展,对系统功能代码的复用和扩展也做了必要的叙述;对所做的工作做了必要的总结,并且对工作的创新之处做了比较详细的介绍,对后续工作的切入做了必要的陈述。

关键词: 半导体器件模拟; 软件设计; 数值分析; 模型

## Abstract

This paper has seven chapters. In the first chapter we introduce the essential concept of semiconductor devices' simulation which including the definiens of semiconductor devices' simulation, the history of semiconductor devices' simulation, the category of semiconductor's simulation and why do people developing the technology of semiconductor devices' simulation. In the chapter 2 we described the main two methods of semiconductor devices' simulation. We also introduce the basic mathematics knowledge of semiconductor devices' simulation and the basic knowledge of physics relate to semiconductor devices' simulation. And some knowledge about Computer-aided design is also been described. In the next chapter we work out the main arithmetic of fundamental semiconductor devices. In chapter 4 we described the main frame of our simulation system of semiconductor devices and the frame of every module. In the chapter 5 we described each function of every module and some coding of numerical analysis of basic semiconductor devices. In chapter 6 we introduced the interface of our system and we also described the code reused methods. At the last chapter we summarized all the work that we have done in semiconductor devices' simulation system designing and emphasize the innovation of our system. After this we also introduced some threshold for succeeders.

**Key words:** simulation of semiconductor devices, software designing, numerical analysis, model

# 第一章 绪言

人类已经告别 20 世纪，进入一个新的千年。回顾过去，20 世纪确实是一个不平常的百年，它的前半叶，人类遭受战乱的浩劫与贫困的折磨，而在后半叶，人类正逐步享受现代科技文明所带来的各种前所未有的物质条件以及生活方式。而这一个新的文明的主要标志就是半导体工业和微电子技术的飞速发展，这是一百年前人们不曾预料的，是现代科学的一个奇迹。如今微电子技术已经深透到人们的工作，生活以及一切生产活动中，它已经成为现代化生产与现代化生活的主要支柱。微电子技术的发展是由晶体管发明而拉开的，自从 1947 年肖克莱（Shockley）和摩根（Morgan）发明世界上第一个点接触式晶体管以后，一个新的时代（硅石时代）开始了。从 1968 年开始有关硅材料器件和电路论著的发表数已经超过了钢铁方面的论著。标志着微电子产业已经在整个世界的经济体系中支柱产业的地位。当前，世界 GNP 增值的 65% 与微电子技术有关。微电子产业已成为促进国民经济持续发展和保证国家安全的战略性基础产业。微电子技术发展水平也已经成为衡量一个国家综合国力的重要因素。可以预见，在 21 世纪中微电子技术与产业仍然将会以迅猛的速度向前发展<sup>[1]</sup>。

随着微电子技术的迅速发展，大规模集成电路器件的尺寸越来越小，多维效应越来越显著，传统的设计方法已经不能满足器件设计的需要，计算机辅助设计（CAD）技术成为分析与设计大规模和超大规模集成电路的重要手段，半导体器件的计算机模拟技术是 CAD 技术的重要组成部分，它在半导体器件的物理分析、新型结构器件的预研、超大规模集成电路的设计和 optimization 等许多方面均有较高的实用价值，因而受到了科技人员的普遍重视，并得到了日益广泛的应用。本文做的工作就是在我系曾云教授、颜永红教授、成世明同学以及前几届的师兄做的大量的半导体器件物理模型研究成果的基础上选取合适的半导体器件模型，用合适的图形开发工具，进行我们自主的半导体器件模拟软件设计与开发的探索。

## 1.1 半导体器件模拟的定义

半导体器件模拟是一项发展模型的技术，器件的实际特性能利用这种模型从理论上予以模拟。例如，考虑如图 1.1 所示的晶体管。晶体管的制造过程包括许多步骤，它们依次从许多预定的设计条件——例如原始材料和外延层的电阻率，多次杂

质扩散过程的结深和表面电阻率，发射区和基区的横向尺寸。这些量称为器件的设计参数。一个适当的晶体管模型能够预测样品完工后显示的电特性，包括静态伏安特性、电流放大系数、截止频率和开关特性。

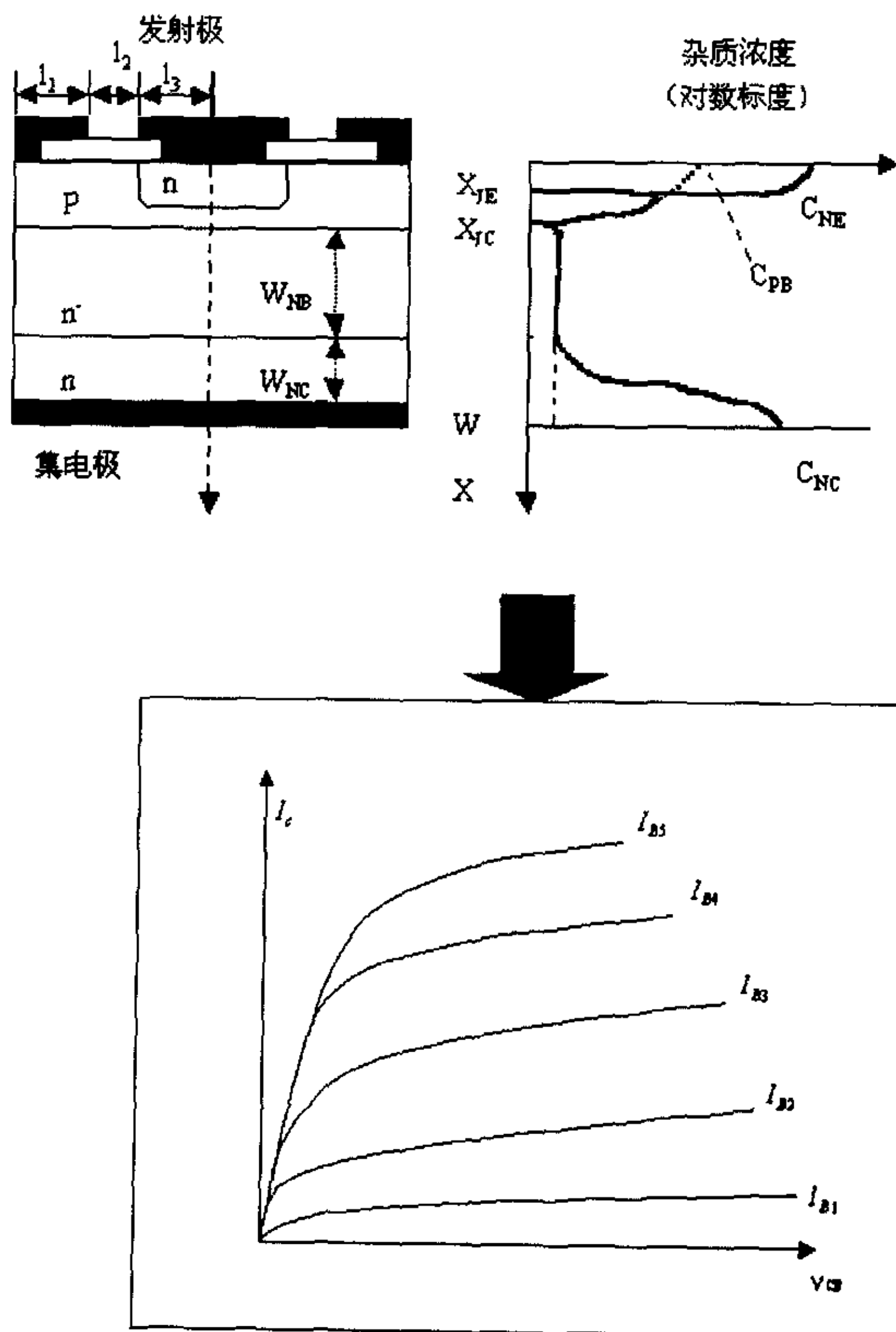


图 1.1 器件模拟概念

实际器件的特性通常是设计参数的函数。因此，模型对任何一组设计参数都必须产生精确的理论结果。

半导体器件的计算机模拟是运用计算机做工具来进行器件的模拟分析。通常我们给出这样的定义——半导体器件的计算机模拟是指：对所研究的半导体器件建立或者选用合适的物理模型，并对其抽象得到相应的数学表述，然后利用合适的方法

开发出计算机软件，并赋予器件的工艺、几何尺寸、电学方面的模型参数，进行计算，得到器件的特性及其内部的物理图形。

## 1.2 半导体器件模拟的发展简介

半导体器件模拟的概念起源于肖克莱（Shockley）1949年发表的论文，这篇论文奠定了结型二极管和晶体管的基础。从一组微分方程出发，肖克莱得到了半导体器件的特性。以后，古默尔（Gummel）首先用数值方法代替解析方法模拟了一维双极晶体管<sup>[2]</sup>，从而使半导体器件模拟向计算机化迈进。随着大规模集成电路（LSI）以及超大规模集成电路（VLSI）的诞生和发展，器件的尺寸越来越小，多维效应也越来越显著，因而相应地，器件模拟工作者们的主要注意力也逐渐放在二维及三维模拟上了。作为研究器件物理，预研新型结构器件的有效工具，半导体器件计算机模拟技术已经成为集成电路发展的前沿科学之一，并得到了日益广泛的应用。

众所周知，半导体器件的新型结构的传统研究方法是以试验为基础，即首先要建立适当的工艺程序，然后进行试制并完成器件的检测，再与初始设计的指标比较，看是否符合要求，若不符合则须重新修改工艺程序和器件结构的参数，并进行新的试制过程。这种研究方法往往包括许多次从工艺试制到测试比较的循环，随着基层电路复杂性的不但增加，传统的研究方法已不适合，因而发展了计算机辅助设计技术，实践证明，在工艺和器件的研究与发展中，实用完美的器件模拟是有效且经济的。

例如，CMOS工艺过程可以包括九个光刻步骤，六个离子注入步骤和几个扩散、退火及氧化步骤。在计算机上，人们能够模拟所有关键的工艺步骤，相应的器件性能的过程仅仅是几分钟、几个小时的事情，而传统的试制周期长得多且成本高得多。

由于超大规模集成电路（VLSI）器件及电路性能与工艺条件密切相关，因而，器件模拟与工艺模拟必须相互结合。本文假定器件模拟中所有有关工艺的信息（如掺杂分布等）已经由精确的工艺模拟软件获得。

器件模拟尽管属于CAA（计算机辅助分析）的范畴，但由于与CAD（计算机辅助设计）技术紧密相关，因而常归类于器件的CAD技术。

## 1.3 半导体器件计算机模拟分类

半导体器件的计算机模拟可以从不同的角度作如下分析：从器件模拟的空间维

数划分,可分为一维、二维及三维;从器件模拟与时间的关系划分,可分为瞬态模拟和稳态模拟;从器件模拟应用的物理模型划分,可分为经典模型、半经典模型、和全量子模型;从模拟的对象划分,可分为MOS器件模拟、双极型器件模拟、GaAs MOSFET模拟、传感器件模拟以及其它半导体器件模拟。表1.1给出了器件模拟的基本分类。实际上,近年来由于器件模拟技术的发展,这些类别间的界限也模糊起来,图1.2给出了这些划分方法之间的内在联系<sup>[3, 4]</sup>。

表 1.1 半导体器件计算机模拟分类

MOS 器件	泊松方程、电流连续性方程或玻耳兹曼方程	1-3 维	有限元法、有限差分法或蒙特卡罗法	耦合方法、非耦合方法或粒子模拟方法	经典模型或半经典模型
双极型器件	泊松方程、电流连续性方程	1-3 维	有限元法、有限差分法	耦合方法或非耦合方法	经典模型
GaAs MOSFET	泊松方程、电流连续性方程或玻耳兹曼方程	1-2 维	有限元法、有限差分法或蒙特卡罗法	耦合方法、非耦合方法或粒子模拟方法	经典模型或半经典模型
传感器件及其它	麦克斯韦方程组、电流连续性方程及其它模型方程	1-2 维	有限元法、有限差分法	耦合方法或非耦合方法	经典模型



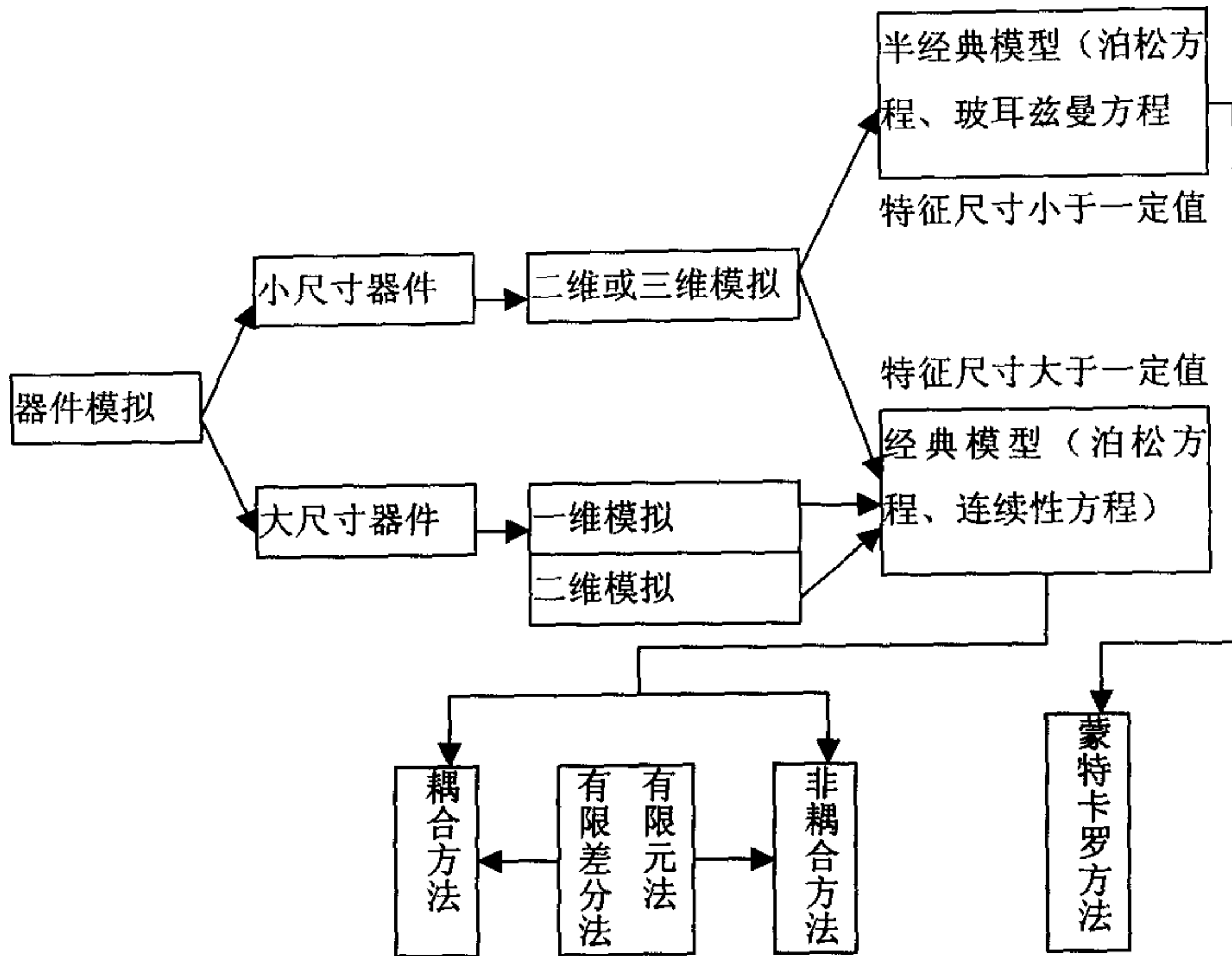


图 1.2 各划分方法之间的内在联系

## 1.4 半导体器件模拟软件现状

### 1.4.1 流行半导体器件模拟软件简介

早期的器件模拟限于一维分析，随着 VLSI（大规模基层电路）的发展，器件的二维、三维模拟软件也越来越多。一维器件模拟方面的软件主要有美国斯坦福大学的 SEDAN 等。二维器件模拟方面比较著名的软件有 MINIMOS、PISCES 和 APSYS。比较著名的商用器件模拟软件有美国 Silvaco International 公司的 ATLAS 系列，它在器件的一维、二维，三维模拟上都有广泛的应用。

### 1.4.2 国内器件模拟软件的发展简介

国内做 EDA 软件的公司比较少，专门做的器件模拟软件方面的公司就更加少了。国内最有名的 EDA 软件是中国华大集成电路设计中心开发的熊猫集成电路 CAD 系统以及它的换代产品九天 EDA 系统。具有优良的性能和友好的界面。它为芯片设计师提供了一系列优秀工具。主要有：ZeniVDE--VHDL/Verilog 设计环境；ZeniVERI--甚大规模版图验证工具；ZeniPOWA--功耗分析工具；ZeniLE--超级版图

编辑器；ZeniDESIRE--版图转换工具，尤其是在高层次语言的设计输入与模拟以及版图设计验证方面，提供了很好的解决方案。

在器件模拟方面清华大学微电子研究所、中科院微电子所、复旦大学微电子中心、东南大学、湖南大学微电子教研室等高校和研究所都做了大量的器件模拟建模和基于现有的软件的建立模型库的工作。清华大学微电子所在上个世纪 80 年代开发过一些器件模拟软件“一体化模拟系统”等。西安理工大学还开发了新型功率半导体器件模拟软件可对 MCT、IGBT 及其他各种新型功率半导体器件进行模拟，辅助设计。该软件考虑了各种物理参数，模拟精确，可模拟器件的 I-V 特性，根据掺杂，寿命分布等参数计算器件的通态压降及电源的二维分布，显示载流子矢量图，模拟开关和触发特性等。但是总体上来说，国内的半导体器件分析模拟软件的研究还有待深入。

## 1.5 开发器件模拟软件的实际意义

随着集成电路集成度的不断提高，生产工艺的不断增加，往往一个普通的集成电路，一个高性能的器件的制造，整个工艺过程可能包括几十道工序，涉及上百个甚至上万个工艺参数。这样由传统的反复试验迭代的方法已经很难适应现实的要求。计算机模拟和辅助设计成为器件研究与发展的必要的也是最经济的手段。

微电子产业作为信息社会的支柱产业，已经成为衡量一个国家综合国力的重要因素。据有关数据显示：未来 5 年，仅上海将投资 700 亿元以上发展微电子产业，形成 10 条以上的芯片生产线。半导体器件的模拟是属于微电子技术领域的基础性的研究，很大程度上影响了半导体技术的发展，因而非常重要。另外在半导体器件模拟以及计算机辅助设计领域，国外先进产品的出口一度对我国做出很大的限制，而且目前国外产品几乎占据了绝大部分的市场份额。无论从经济上还是从我国微电子产业发展的战略高度上来看，发展我们自己的器件模拟软件都有很积极的现实意义。



## 第二章 半导体器件模拟软件基础

### 2.1 概述

本章是全文的基础理论部分，通过对半导体器件模拟的数学基础知识、物理基础知识、计算机的各个方面需要的基础知识进行了简单的介绍，使我们对半导体器件模拟软件的基础有了基本的了解。首先介绍了半导体器件模拟的两种基本方法：数值分析方法以及解析模型方法；然后是介绍半导体器件模拟的数学基础偏微分方程的解法：有限元、有限差分法和蒙特卡尔，接着我们介绍了常规 VLSI 器件以及小尺寸 VLSI 器件的基本物理方程，本章的最后介绍了 CAD 模拟软件的计算机基础。

#### 2.1.1 半导体器件模拟的基本方法

在器件模拟当中一般采用两种方法：数值计算分析法和解析模型法<sup>[5]</sup>。

##### 2.1.1.1 数值分析方法

在合理的假设条件、适当的边界条件和一定的初始条件下，求得器件基本微分方程组解的方法即为数值计算分析方法。一般采用有限元法和有限差分法。

有限元法是将器件结构划分为多个单元，对每个单元用插值法建立有限元方程，再组合成整体进行数值求解；有限差分法是先建立微分方程，再对微分方程进行时间与空间的离散化，利用牛顿-拉菲森等方法对其线性化建立线性差分方程并求解。

##### 2.1.1.2 解析模型方法

从基本物理方程出发，在一定的边界条件下，根据一定的假设、近似或者拟合推导出近似表达式建立器件的解析模型来代表器件的性能，通过提取器件模拟参数进行计算机模拟分析，这种方法称为解析模型分析法。

用解析模型分析法分析器件需要做很多近似假设，如小注入近似、缓变沟道近似、均匀基区近似等等，但实际器件并不完全满足这些近似，因此只能得到近似的分析结果。而随着计算机技术与数值分析方法的迅速发展，只要作几个假设就可以用数值分析法求解半导体器件基本方程得到比较准确的解，因此数值分析方法的研

究近年来得到了快速发展。当然，并不能说解析分析法已过时，解析模型能定性的了解器件中各参数之间的相互关系，结合两者的优点通过器件模拟就能更深入的了解器件内部的特性以及影响器件特性的各种因素，以便于进行器件的优化设计。

## 2.2 半导体器件模拟的数学基础

我们知道，半导体器件的模型方程是由某些线性方程和非线性的偏微分方程组成。因此，要进行半导体器件的数值模拟，首先必须了解求解偏微分方程的数值方法。常见的确定性数值方法由两类：有限差分法和有限元法<sup>[6,7,8]</sup>。

### 2.2.1 有限差分法

用有限差分法求解偏微分方程的基本过程是：（1）在问题的待解区域进行网格划分；（2）差分离散偏微分方程和边界条件，获得一系列的差分方程；（3）对非线性方程进行线性化处理；（4）运用适当的数值方法求解所建立的高阶稀疏线性方程组。

常见的有限差分离散方法有很多形式。在半导体器件的数值模拟中，广泛采用的是守恒差分离散方法，这种离散方法的本质就是利用物理学的守恒原理导出差分方程。差分方程又叫差分格式。相应地，利用守恒差分离散方法导出地差分方程又叫做守恒型差分格式。图 2.1 是一守恒差分格式的示意图， $C_m$ 是联系中心格点和外部格点连线的平分线， $h_x$ 、 $h_y$ 分别是 x、y 方向的格点间距， $s$  表示  $c_1 - c_4$  围成的区域。

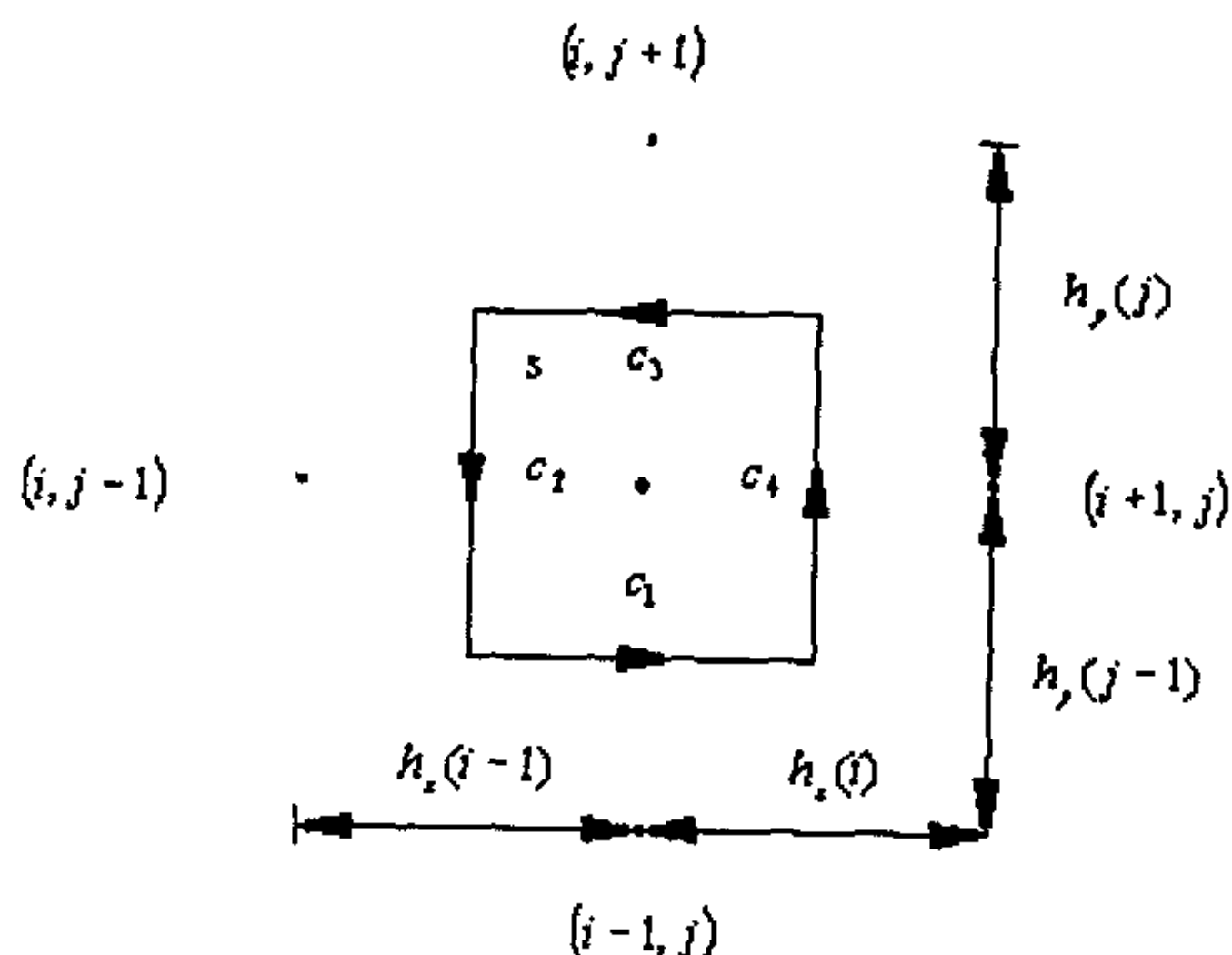


图 2.1 差分格式说明

对二维泊松方程

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{s} \quad (2.1)$$

应用高斯积分公式得到

$$\begin{aligned} \iint_s \nabla^2 \varphi dx dy &= \iint_s -\frac{\rho}{s} dx dy \\ &= \oint_c \nabla \varphi \cdot r dl \end{aligned} \quad (2.2)$$

式中  $r$  表示  $s$  的外法向,  $c$  由  $c_1 - c_4$  组成。若用格点上的变量来表示式 (2.2), 则可以得到相应于式 (2.1) 的五点差分格式:

$$\begin{aligned} &\frac{[h_x(i) + h_x(i-1)]}{2h_y(j)} [\varphi(i, j+1) - \varphi(i, j)] + \frac{[h_x(i) + h_x(i-1)]}{2h_y(j-1)} [\varphi(i, j-1) - \varphi(i, j)] \\ &+ \frac{[h_y(j) + h_y(j-1)]}{2h_x(i)} [\varphi(i+1, j) - \varphi(i, j)] + \frac{[h_y(j) + h_y(j-1)]}{2h_x(i-1)} [\varphi(i-1, j) - \varphi(i, j)] \\ &= -\frac{[h_x(i) + h_x(i-1)][h_y(j) + h_y(j-1)]}{4\varepsilon} \end{aligned} \quad (2.3)$$

由于式中 (2.2) 意味着通过对边界进入  $s$  的电位移通量与  $s$  内的负电荷相等, 而这正是物理学的电荷守恒原理, 因而, 五点差分格式 (2.3) 满足电荷守恒关系。在一维和三维空间, 应用守恒原理做类似与 (2.3) 的推导我们还可以得到泊松方程的三点和七点差分格式。

一般情况下, 由于存在边界条件和介质间断条件, 内部格点的差分格式[如式 (2.3)]并不适合用边界和介质交界面, 常见的偏微分方程的边界条件有三类:

第一类 给定边界的函数值 如

$$\varphi = \varphi_s \quad (2.4)$$

第二类 给定边界外法向导数, 如

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = \xi \quad (2.5)$$

第三类 给定边界上函数及外法向导数的线性组合值, 如

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} + \eta \varphi = \xi \quad (\eta > 0) \quad (2.6)$$

在介质交界面上, 介质间断条件有如下形式:

$$\varepsilon_1 \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)_1 - \varepsilon_2 \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)_2 = -\rho_{ss} \quad (2.7)$$

式中  $r$  由介质 1 指向介质 2。半导体器件中 Si-SiO<sub>2</sub> 界面就是存在上述关系，这时， $\varepsilon_1$  和  $\varepsilon_2$  分别表示介质 1 和介质 2 的介电常数， $\rho_{ss}$  是界面电荷密度。

在半导体器件模拟中，应用最多的是第一、第二边界条件和介质间短条件。对于第二类边界条件，考虑边界，由式 (2.2)，有边界处的差分格式：

$$\begin{aligned} & \frac{[\varphi(M, j) - \varphi(M, j-1)]}{2h_y(j-1)} h_x(M-1) + \frac{[\varphi(M, j) - \varphi(M-1, j)]}{2h_x(M-1)} \times [h_y(j) + h_y(j-1)] \\ & + \frac{[\varphi(M, j) - \varphi(M, j+1)]}{2h_y(j)} h_x(M-1) - \xi \frac{[h_y(j) + h_y(j-1)]}{2} \\ & = \frac{[h_y(j) + h_y(j-1)] h_x(M-1)}{4\varepsilon} \rho(M, j) \end{aligned} \quad (2.8)$$

在式 (2.8) 中，第二类边界条件与守恒原理均得到了满足，因此守恒差分离散方法是比较优越的。

值得指出，差分格式是偏微分方程在矩形网格上离散得到的，所以有限差分方法特别适合求解的区域为矩形或者矩形的组合。图 2.3 所示是一矩形组合的求解区域，实际分析可将求解区域套在一个规则的矩形网格上，并将格点分为两类：一类在求解区域内，是计算点；一类在求解区域外是不计算点。

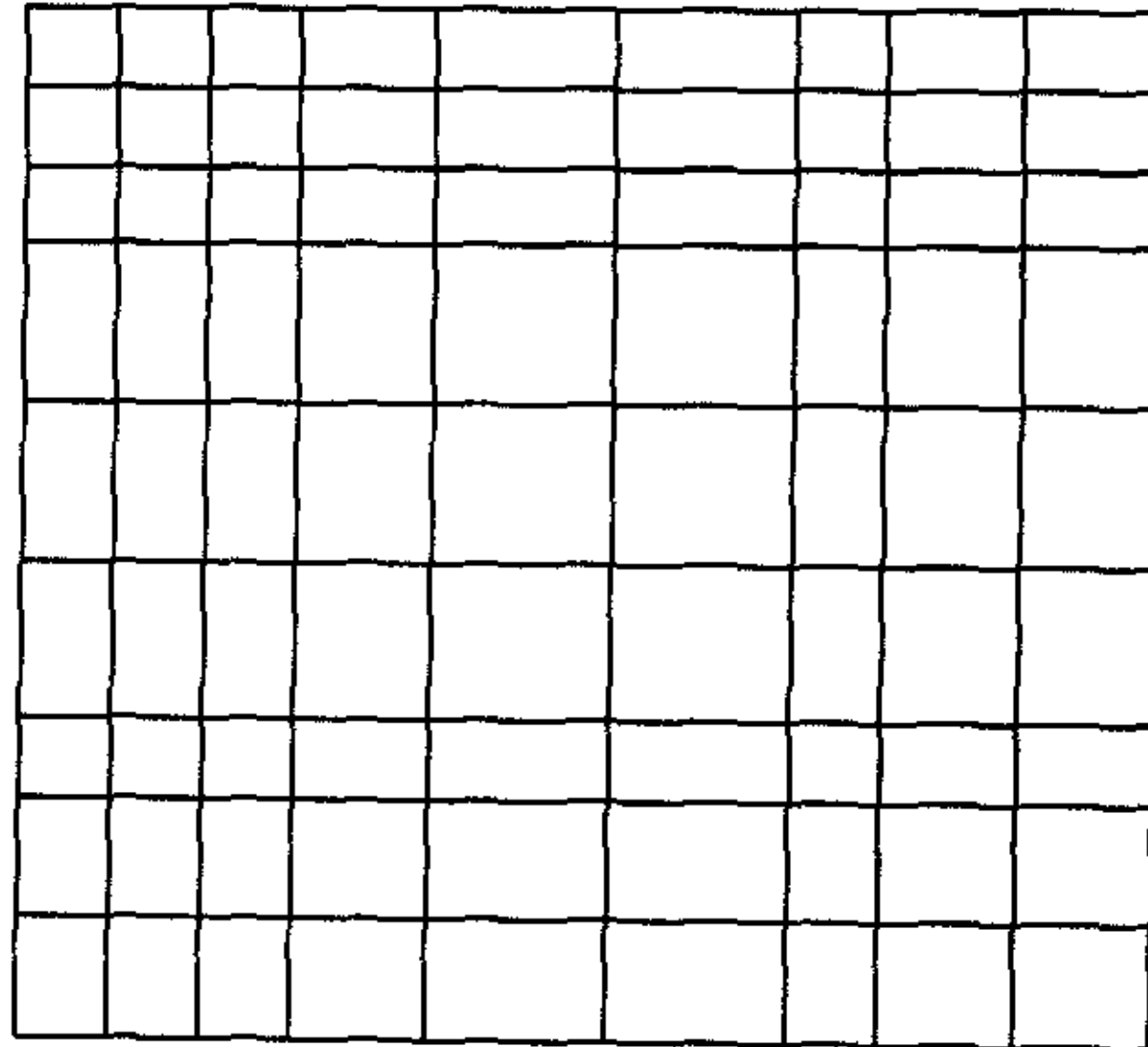


图 2.2 矩形组合区域的网格

另外，为求解问题方便，需要时可引用“中线”网格（原始网格中由格点之间的中线形成的网格）与原始网格互相辅助。图 2.4 是一种“中线”网络的示意图。

从守恒差分格式的推导过程不难看出,这种嵌套的网格尤其适合于构造守恒差分方程。

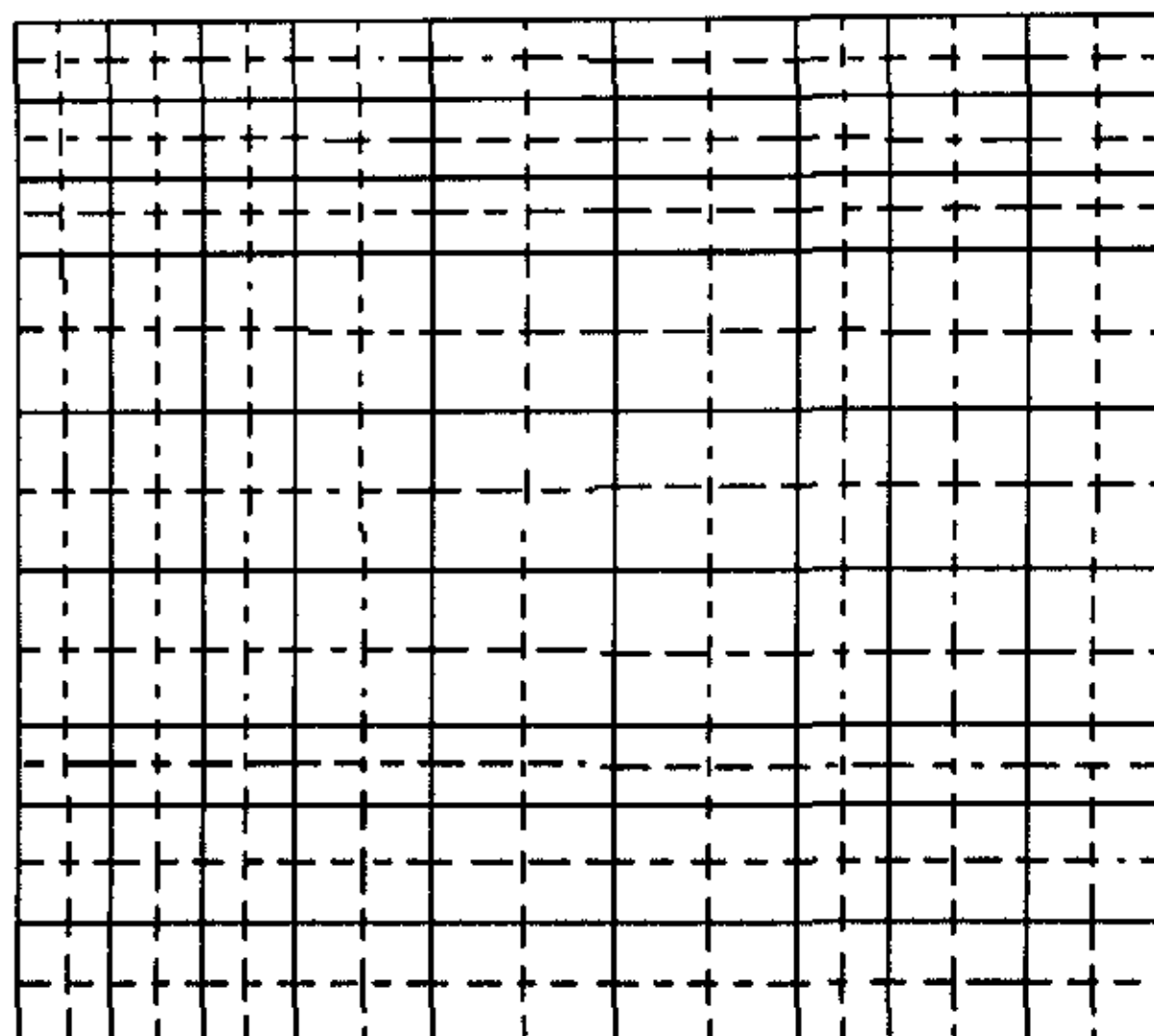


图 2.3 中线网格示意图

一般而言,有限差分方法具有如下特点:

- (1) 差分格式简洁。典型的是三点、五点和七点差分格式,在半导体器件的一维、二维和三维模拟中,分别采用这三种差分格式。
- (2) 适合处理边界不太复杂的问题。大多数半导体器件(如 MOS 器件、双极型器件)的边界是简单的,可以用有限差分方法处理。
- (3) 编制程序方便。差分格式是规格化的,人们无须对每个格点列出差分方程,只须列出少数几种典型的格式,而在同类型的格点上重复套用。对于半导体器件而言,只须列出器件内部格点和边界格点的为数有限的差分格式。

## 2.2.2 有限元法

有限元法是另一种常见的确定性数值方法,近年来得到了广泛重视。它不仅被用于力学、电磁场和温度场等多种领域的研究,而且已经被成功的用于半导体器件的分析。它的基本思想是:一个偏微分方程的边值问题可以和一个泛函的极值问题(即变分问题)联系起来,原来的偏微分方程正是使这个泛函取极值的函数所满足的方程。当我们求出使泛函取极值的函数,则得到了原方程的解。为了确定使泛函取极值的函数,有限元法将求解区域从几何上进行剖分,广义上来说,剖分为一系列点单元,线单元、面单元和体单元,然后按剖分的单元进行函数的插值,进而总体合成,构成总体的函数插值,从而将泛函的极值问题转化成多元函数的极值问题,

后者对应于一组线性方程，求解这组方程即可以获得问题的解。当很难找到相应于某一待解方程的泛函表达式时，可以用带权剩余的方法

一般而言，有限元方法的几何剖分很灵活，故特别适合于处理边界复杂的问题，而且，以后将证明，能量积分已经计入了介质间断条件和第二类，第三类边界条件，从而大大简化了边界条件的处理。

有限元法求解，一般分五个步骤：（1）寻找适当得能量积分；（2）进行几何剖分和分片插值；（3）进行单元分析，逐个单元地定出各单元方程组地系数项和常数项；（4）进行总体合成，按照每个单元分析后得到地系数项和常数项在总体中的位置进行累加，形成最后的代数方程组；求解代数方程组。

与有限差分方法相比，有限元法有如下特点：

- （1）有限元方法导出的方程自动满足介质间断条件和第二、第三类边界条件。这对于有多层介质的半导体器件的模拟尤为有用。
- （2）有限元方法以变分原理和剖分插值为基础，灵活性强，适合处理边界复杂的问题。
- （3）有限元线性方程组的形成必须经过几何剖分与插值、单元分析和总体合成各个步骤。相应的程序编写显复杂。
- （4）有限元方程组的系数剧增常常有良好的特性，如对称性、正定性等。

### 2.2.3 高阶稀疏线性方程组的解法

用有限差分方法或者有限元方法将偏微分方程及其边界条件离散处理以后，得到相应的高阶稀疏线性方程组。该方程组的解法有两种：一种是迭代法，一种是直接法。对于半导体器件模拟，两种方法都可以采用。迭代法实现简单，占用计算机资源少，但收敛有时得不到保证，特别是当载流子连续性方程离散后出现“病态”情况时，用迭代法求解可能会引起解发散，这时可选用直接解法。一般说，直接解法占用计算资源较多，所以三维模拟一般采用迭代法；在二维模拟中，也倾向使用迭代法；除非连续性方程离散后得系数矩阵严重“病态”；在一维模拟中两种方法都可以使用。

#### 2.2.3.1 迭代法

##### 一 SOR、SLOR 和 SBOR 方法<sup>[9]</sup>

SOR、SLOR 和 SBOR 方法是最基本的迭代方法，主要应用于半导体器件的二维模拟。



### 1. SOR (连续超松弛: Successive Overrelaxation) 方法

设一线性方程组有矩阵矢量形式

$$AX = Q \quad (2.9)$$

其中

$$\begin{aligned} A &= (a_{ij}) \\ Q &= (q_i) \quad X = (x_i) \\ (i, j) &= 1, 2, \dots, M \end{aligned} \quad (2.10)$$

超松弛迭代的过程是:

$$\bar{x}_i^{l+1} = a_{ii}^{-1} (q_i - \sum_{j=2}^{M_1} a_{ij} x_j^l) \quad (2.11)$$

$$x_i^{l+1} = x_i^l + \omega (\bar{x}_i^{l+1} - x_i^l) \quad (2.12)$$

.....

$$\bar{x}_i^{l+1} = a_{ii}^{-1} (q_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{l+1} - \sum_{j=i+1}^{M_1} a_{ij} x_j^l) \quad (2.13)$$

$$x_i^{l+1} = x_i^l + \omega (\bar{x}_i^{l+1} - x_i^l) \quad (2.14)$$

.....

$$\bar{x}_{M_1}^{l+1} = a_{M_1 M_1}^{-1} (q_{M_1} - \sum_{j=1}^{M_1-1} a_{M_1 j} x_j^l) \quad (2.15)$$

$$x_{M_1}^{l+1} = x_{M_1}^l + \omega (\bar{x}_{M_1}^{l+1} - x_{M_1}^l) \quad (2.16)$$

式中  $l$  是迭代次数,  $\omega$  为超松弛因子,  $1 \leq \omega \leq 2$ , 一般情况下,  $\omega$  值可以凭经验选取。

### 2. SBOR (连续块超松弛: Successive Block Overrelaxation) 方法

仍然分析方程组  $AX = Q$ 。这时系数矩阵  $A$  的元素  $a_{ij}$ 、解向量  $X$  的元素  $x_i$ 、常数项元素  $q_i$  均由子块组成, 即

$$\begin{aligned} a_{ij} &= (a_{kk'}) \\ q_i &= (\beta_k) \quad x_i = (v_k) \\ (k, k') &= 1, 2, \dots, M_2 \end{aligned} \quad (2.17)$$

在这种情况下, 仍然进行 SOR 迭代, 这种方法被称为 SBOR 方法。

### 3. SLOR (连续线超松弛: Successive Line Overrelaxation)

根据 SBOR 方法的定义, 我们知道, SBOR 方法实际上就是分块 SOR 方法, 即将整个方程组的所有方程式和未知数进行分组, 使每一方程和未知数均属于且仅属于某一组。进行 SOR 迭代时, 从这个子方程组同时确定相应的一组变量近似解,

由式 (2.11) - (2.16) 按组计算下去, 直到得到全部的变量近似解, 再进行下一次 SBOR 循环。

在利用有限差分法求解偏微分方程的边值问题时, 常将一个网格线的所有未知数及相应的差分方程分在一个组内, 这种方法被称为 SLOR 方法, 所以可以认为 SLOR 方法是 SBOR 的特例。

## 二 SIP 方法<sup>[10]</sup>

SIP 方法 (即强隐含迭代方法) 是 Stone 1968 年首先提出并用于求解二维热分布方程的。这种方法由于具有收敛快, 收敛特性与系数矩阵的关系不明显等优点, 而在半导体器件的二维模拟中得到广泛应用。国际上一些较为流行的软件包, 如 MOS 器件二维分析软件 MINIMOS 也采用这种迭代方法。

设在一矩形域用守恒方法差分离散一椭圆型偏微分方程及其边界条件, 则可以得到相应的线性方程组

$$B(i, j)T(i, j-1) + D(i, j)T(i-1, j) + E(i, j)T(i, j) + F(i, j)T(i+1, j) + H(i, j)T(i, j+1) = q(i, j)$$

$$0 \leq i \leq N_1, \quad 0 \leq j \leq N_2 \quad (2.18)$$

其中  $T$  为待解变量,  $B$ 、 $D$ 、 $E$ 、 $F$ 、 $H$  为系数项,  $q$  为常数项,  $N_1 + 1$  和  $N_2 + 1$  分别为  $x$ 、 $y$  方向的网格线数。式 (2.18) 可以记为矩阵矢量方程

$$AT = Q \quad (2.19)$$

如果将式 (2.19) 改变为下述形式:

$$(A + W)T = (A + W)T - (AT - Q) \quad (2.20)$$

并设第  $l+1$  次迭代解为  $T^{l+1}$ , 则有与式 (2.19) 等价的迭代方程

$$(A + W)T^{l+1} = (A + W)T^l - (AT^l - Q) \quad (2.21)$$

若定义矢量

$$\delta^{l+1} = T^{l+1} - T^l \quad (2.22)$$

和  $R^l = Q - AT^l \quad (2.23)$

则矩阵矢量方程 (2.21) 转化为

$$(A + W)\delta^{l+1} = R^l \quad (2.24)$$

其中  $R^l$  的矩阵元

$$R^l(i, j) = q(i, j) - [B(i, j)T^l(i, j-1) + D(i, j)T^l(i-1, j) + E(i, j)T^l(i, j) + F(i, j)T^l(i+1, j) + H(i, j)T^l(i, j+1)] \quad (2.25)$$

求解方程 (2.24) 的基本方法是 LU 分解高斯消去法。这种方法将系数矩阵  $A + W$  分解为上三角阵  $U$  和下三角阵  $L$  的乘积。由

$$LU \delta^{l+1} = R' \quad (2.26)$$

并令  $V = U \delta^{l+1}$ , 有

$$LV = R' \quad (2.27)$$

由于  $L$  为下三角阵, 上述方程很容易递推求解, 求出  $V$  以后代入

$$V = U \delta^{l+1} \quad (2.28)$$

因为  $U$  是上三角阵,  $\delta^{l+1}$  也可以方便地解出。

### 三 ICCG 方法

我们讨论线性方程组

$$A'T = Q' \quad (2.29)$$

$A'$  是稀疏和对称的  $M$  矩阵。  $M$  矩阵的定义为: 矩阵

#### 2.2.3.2 直接求解

直接求解方法实际上是  $LU$  分解高斯消去法和稀疏矩阵技术的结合。

#### 2.2.4 蒙特卡罗法

蒙特卡罗法 (Monte Carlo) 方法<sup>[11]</sup>是一种通过随机变量的统计试验, 随机模拟求出问题近似解的方法, 亦称为统计试验方法或者随机模拟方法。其基本思想是, 首先建立一个概率模型或随机过程, 使它的参数等于待求问题的解, 然后通过对概率模型进行随机变量的抽样试验或观察随机过程来计算所求参数的统计特征, 最后给出所求解问题的近似值。

## 2.3 半导体器件模拟的物理基础

### 2.3.1 半导体器件模拟的基本方程

#### 2.3.1.1 常规 VLSI 器件的模拟方程

对于常规 VLSI 器件以及其它各种频率不高, 尺寸不太小的半导体器件, 在外部电场作用下, 描述器件特性的模拟方程可以分成三部分: 麦克斯韦方程组、电流密度方程和电流连续性方程<sup>[12,13]</sup>。

#### 一、麦克斯韦方程组

麦克斯韦方程组是半导体器件中所有电磁现象的基础:

$$\nabla \times E_i = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (2.30)$$

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} + J_{\text{传导}} = J_{\text{总电流}} \quad (2.31)$$

$$\nabla \cdot D = \rho \quad (2.32)$$

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (2.33)$$

式中点位移矢量  $D$  和电场矢量  $E_l$  的关系是  $D = \epsilon E_l$  ( $\epsilon$  是半导体介电参数), 磁感应强度  $B$  和磁场强度  $H$  的关系是  $B = \mu H$  ( $\mu$  是半导体磁导率),  $\rho$  是电荷密度。

一般情况下, 我们感兴趣的是泊松方程, 它描述了整个空间的电荷与电场梯度的关系:

$$\epsilon \nabla \cdot E_l = -\epsilon \nabla^2 \varphi = \rho \quad (2.34)$$

这里  $\rho = -q(n - p - N)$ ,  $N = N_d^+ - N_a^-$  是净掺杂浓度,  $N_d^+$  和  $N_a^-$  分别是离化施主浓度和受主杂质浓度,  $q$  是单位电荷质量,  $n$  和  $p$  分别是电子浓度和空穴浓度,  $\varphi$  是电位。

## 二、电流密度方程

电子和空穴的电流密度包括漂移分量和扩散分量, 可以分别表示为

$$J_n = q\mu_n n E_l + qD_n \nabla n \quad (2.35)$$

$$J_p = q\mu_p p E_l - qD_p \nabla p \quad (2.36)$$

式中  $\mu_n$  和  $\mu_p$  分别是电子和空穴的迁移率,  $D_n$  和  $D_p$  是相应的扩散系数, 扩散系数与迁移率由爱因斯坦关系所联系:

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (2.37)$$

对于非简并材料, 平衡条件下的电流密度为零, 载流子浓度由玻耳兹曼近似给出:

$$n = n_i \exp\left[\frac{q(\varphi - \phi_F)}{kT}\right] \quad (2.38)$$

$$p = n_i \exp\left[\frac{q(\phi_F - \varphi)}{kT}\right] \quad (2.39)$$

其中  $n_i$  是本征载流子浓度,  $\phi_F$  是平衡条件下的费米势。从 (2.38) 和 (2.39) 可以得出平衡条件下的关系式:

$$np = n_i^2 \quad (2.40)$$

在非平衡条件下,电子和空穴浓度偏离平衡值,它们的费米势不能再由单一的 $\phi_F$ 表示。然而我们可以引入电子准费米势 $\phi_n$ 和空穴准费米势 $\phi_p$ ,得到

$$n = n_i \exp\left[\frac{q(\phi - \phi_n)}{kT}\right] \quad (2.41)$$

$$p = n_i \exp\left[\frac{q(\phi_p - \phi)}{kT}\right] \quad (2.42)$$

相应的式(1.11)所表示的关系由下式代替:

$$np = n_i^2 \exp\left[\frac{q(\phi_p - \phi_n)}{kT}\right] \quad (2.43)$$

准费米势的差表征了 $np$ 乘积与它的平衡值的偏离。用式(2.37)、(2.41)、(2.42)改写成(2.37)、(2.38),可得出用准费米势表示的电流密度:

$$J_n = q\mu_n n \nabla \phi_n \quad (2.44)$$

$$J_p = q\mu_p p \nabla \phi_p \quad (2.45)$$

实际上,某些半导体器件中需要重掺杂,如双极型晶体管的发射区,掺杂浓度需要高于 $10^{19} \text{cm}^{-3}$ 。重掺杂对半导体器件的特性影响很大,并可引起禁带变窄、俄歇复合等效应,这些效应的物理机制很复杂,很难进行定量分析。为了在半导体器件模拟中能有效考虑掺杂效应,可以用有效本征载流子浓度 $n_{ie}$ 与 $n_i$ 的关系为

$$n_{ie}^2 = n_i^2 \exp\left[-\frac{\Delta E_g}{kT}\right] \quad (2.46)$$

式中 $\Delta E_g$ 描述了禁带变窄。相应地,载流子浓度表示为

$$n = n_{ie} \exp\left[\frac{q(\phi - \phi_n)}{kT}\right] \quad (2.47)$$

$$p = n_{ie} \exp\left[\frac{q(\phi_p - \phi)}{kT}\right] \quad (2.48)$$

### 三、电流连续性方程

电子和空穴的电流连续性方程为

$$-\frac{1}{q} \nabla \cdot J_n - G_n + R_n + \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad (2.49)$$

$$\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p - G_p + R_p + \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (2.50)$$

这里  $G_n$ 、 $G_p$  分别表示是由碰撞离化以及外部辐射引起的电子和空穴产生率， $R_n$ 、 $R_p$  分别是电子和空穴的复合率。一般

$$G - R = (G - R)_{\text{热学}} + (G)_{\text{雪崩}} + (G - R)_{\text{俄歇}} \quad (2.51)$$

式中  $(G - R)_{\text{热学}}$  描述了体内和表面的肖克莱—里德—霍尔 (Shockley—Read—Hall: SRH) 复合， $(G)_{\text{雪崩}}$  代表雪崩离化而引起的载流子产生项， $(G - R)_{\text{俄歇}}$  代表俄歇效应的贡献。

上面给出的器件模型方程是建立在经典理论基础上的，所以被称为经典模型方程，相应的模型模型称为经典模型。由于电流密度方程计入了漂移和扩散分量，因而该模型也被称为漂移—扩散模型。

### 2.3.1.2 小尺寸 VLSI 器件的模型方程

当半导体器件底特征尺寸小到一定值时，再用经典模型描述特性就会产生很大的误差，并且，对于许多物理现象，如 MOS 器件中的热载流子发射和电子速度过冲等非线性输运现象，也无法解释。因此必须建立更完善的物理模型，当器件的特征长度（如场效应器件的栅长度）达到一定值（Si 器件为  $0.1 \mu\text{m}$ , GaAs 器件为  $0.5 \mu\text{m}$ ）时，在经典方程中需要用玻尔兹曼方程代替电流连续性方程。玻尔兹曼方程的形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} F \cdot \nabla_k f - v \nabla_r f + \sum_{k'} \{f(k')P(k',k) - f(k)P(k,k')\} \quad (2.52)$$

式中  $f$  是载流子分布函数， $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ， $h$  是普朗克常数， $P(k,k')$  是单位时间载流子波矢从  $k$  变到  $k'$  的几率， $v$  是载流子速度（不是漂移速度）矢量， $F$  是作用在载流子上的力

$$F = \pm q(E_i + \frac{1}{c} v \times B) - \nabla_r E(p,r) \quad (2.53)$$

$E_i$  是电场， $c$  是光速， $r$  是位移矢量， $E(p,r)$  是载流子能量。式 (2.53) 右边第一项是外部电场和磁场引起的作用力，第二项是由于固体内部（如声学波引起的）能带不均匀造成的。

为将玻尔兹曼方程和泊松方程联系起来，以完成对小尺寸 VLSI 器件的模拟分析，必须引入一些辅助方程，如表示波矢  $k$  和动量  $P$  的关系方程



$$P = \hbar k \quad (2.54)$$

运动方程

$$\frac{dr}{dt} = v \quad (2.55)$$

$$\frac{dP}{dt} = F \quad (2.56)$$

以及电子（空穴）密度和电流密度方程

$$n(p) = \int f dP \quad (2.57)$$

$$j = \pm q \int v f dP \quad (2.58)$$

方程 (2.54) — (2.60) 与泊松方程

$$\nabla^2 \phi = \frac{q}{\epsilon} (n - p - N) \quad (2.59)$$

相结合，构成小尺寸器件模型方程。由于这种模型将半导体内载流子的运动归纳为一系列外加电场下的加速（由经典理论处理）运动和散射（由量子理论处理）运动，该模型被称为半经典模型。利用这种模型模拟小尺寸半导体器件，可以很好地解释载流子速度过冲等非线性输运效益。

实际上，经典模型是半经典模型地一个特例。如果对半经典模型方程作准静态局部电场近似，则可以将原始的六维空间（动量坐标和普通坐标构成的）问题转化成单一的三维实际空间问题，半经典模型也就等价于漂移—扩散模型。准静态局部电场近似的基本假设是：载流子随着电场的变化速率比电场的有效变化速率快得多，即与载流子的基本响应相比较，器件内部的介电驰豫过程和器件响应要慢得多。这个假设意味着：与器件的特征尺寸相比，最大载流子速度和驰豫时间之积可以忽略。

对于特征尺寸更小的半导体器件，要描述它们的特性，需要建立更精确，更完善的全量子输运模型，这正是理论物理学者正研究的问题之一。

一般而言，一定的模型方程往往是与一定的求解方法相联系的。人们往往用确定性数值方法（如有限元法或者有限差分法）处理漂移—扩散模型，而用统计试验方法（蒙特卡罗方法）处理半经典模型，即进行粒子模拟。确定性数值方法与蒙特卡罗方法各有特点：前者的模拟精度往往很高，计算量少，但处理的对象仅限于不太复杂的问题；后者的模拟精度一般教低，要达到一定的精度，计算费用（占用计

算机内存量及 CPU 时间) 往往相当可观, 但处理问题的范围面广。

## 2.4 半导体器件模拟的计算机基础

### 2.4.1 计算机辅助设计系统简介

当前世界各国都把提高制造业作为发展制造技术的主要方向, 在微电子技术飞速发展的今天, 计算机辅助设计与制造已经成为工业现代化的标志之一。而正如前面所说, 器件模拟尽管属于 CAA (计算机辅助分析) 的范畴, 但由于与 CAD (计算机辅助设计) 技术紧密相关, 因而常归类于器件的 CAD 技术<sup>[14,15]</sup>。

计算机辅助设计技术是一项综合性的、复杂的、正在高速发展之中的高新技术, 它建立在计算机硬件, 外部设备的配置及开发环境和工具的基础上, 如操作系统、窗口管理、图形现实、用户界面、网络技术、数据通讯、程序语言和测试工具等。计算机辅助设计技术涉及到许多的科学领域, 如计算机科学与工程、计算机图形学、软件工程、电子技术等, 体现了现代高技术之间的相关性。

一个典型的计算机辅助设计系统包括: 硬件设备、软件系统、工程数据库等几个部分组成。

### 2.4.2 硬件设备

组成 CAD 系统的硬件设备主要有: 计算机 (主机)、图形现实终端、输入输出设备、扫描仪等部分组成。先进的 CAD 系统通常是以具有图形功能的交互式计算机系统为基础的。这类系统对用户输入的各种信息会迅速作出响应。当前用于 CAD 系统的计算机主要有五类: 个人计算机 (微机)、工作站、小型机、中型机、大型机。其中个人计算机和工作站基本上是单用户的 (现在越来越多的工作站提供了多用户的模式), 后三类是多用户的, 另外, 计算机网络技术又为各类计算机提供了一个充分发挥作用的环境。

### 2.4.3 软件系统

计算机硬件常常是判断一个系统性能的机理, 而软件则是决定这种机理所执行的一套策略。这是评价一个系统所能完成的各种功能的依据。而且系统越大, 软件在总价值中所占的分额越大。

如果硬件工程师关心的问题是“如何快”, 那么软件工程师最关心的是“如何容易”。评价一个硬件性能有较明确的指标, 但评价一个软件的性能就比较复杂,

因为许多情况下与人的主观因素有关,例如用户的专业素质及各种要求均在评价软件性能时占很重要份量。一般来说软件应该满足用户为解决某种工程问题所需要的环境,也就是说软件是一种工具。

CAD 软件由三个部分组成:

- (1) 支撑软件; (或功能软件)
- (2) 应用软件;
- (3) 数据管理软件;

上述三部分构成了 CAD 软件系统它们的相互关系如图 2.5 所示

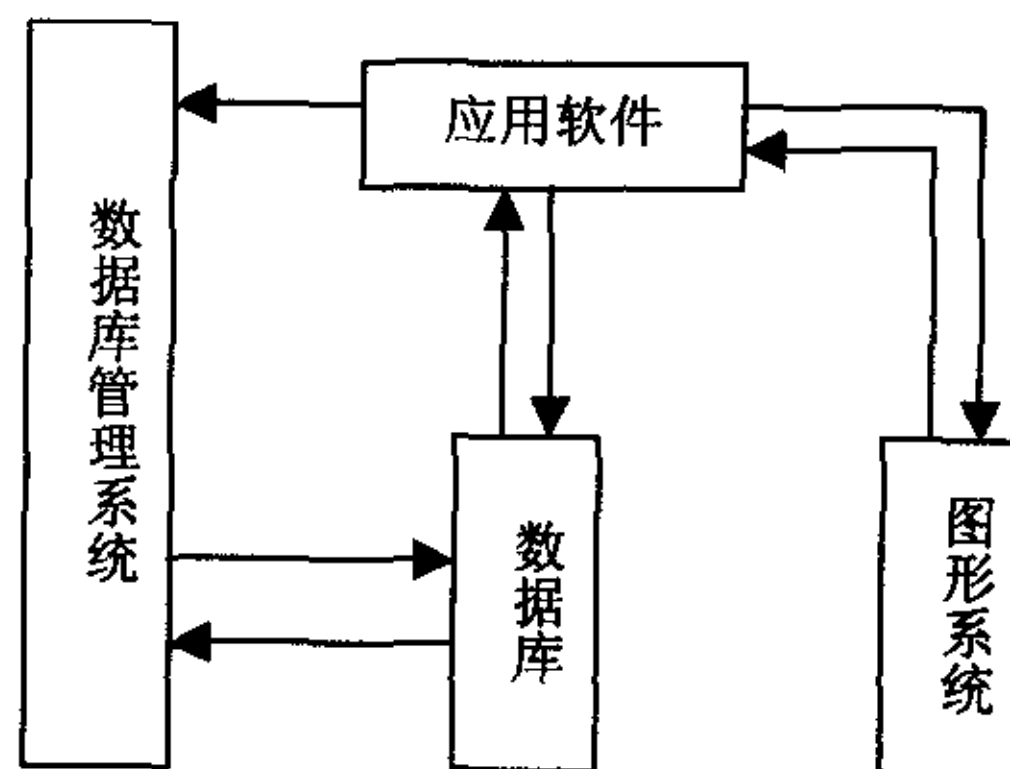


图 2.5 CAD 软件系统结构图

#### 2.4.3.1 支撑软件

这类软件是以系统软件为基础,用来开发 CAD 应用所需要的一切通用软件,同时它也是有各种专门用途的产品应用软件的基础。支撑软件是 CAD 系统的核心部分,目前国内外商业出售的 CAD 系统的软件大部分属于支撑软件。

支撑软件主要包括分析、几何建模、设计、绘图等方面的软件包,供 CAD 系统用户在设计过程中调用。

评价一个支撑软件包时,关键着眼于下述四个方面:

- (1) 完成复杂的分析、设计任务的能力;
- (2) 以数据库为核心、交互图形为手段、通用设计方法为工具的集成化程度;
- (3) 与其它软件包的接口能力;
- (4) 在不同的硬件上可以应用的兼容性和移植能力。

对于一个给定的软件包,需要考虑三个方面的问题:

- (1) 将要连接哪些支撑软件;
- (2) 接口的完备性必须有处理两种数据类型的能力;

(3) 接口的灵活性包括允许用户编写目前该系统不支持的应用程序的接口。

### 2.4.3.2 应用软件

这是用户在系统软件和支撑软件的基础上，为各领域开发各类型 CAD 产品工作所需要的应用软件。这种软件是专门的，一般由用户、或者用户与 CAD 厂商联合开发，而 CAD 厂商通常是不出售这种专用的产品软件的。

从产品应用软件来看，不论哪个领域，都包括产品总体方案设计、各子系统设计及部件、零件设计分析三个层次。

从当前 CAD 系统的发展趋势看，软件的价值越来越大，而硬件在 CAD 系统中所占的比例越来越小。目前市场上流行的商业化 CAD 应用软件，已经可以提供标准的二维绘图、曲面造型、实体造型、质量特性分析、数控编程等功能模块。用户借助应用软件提供的功能模块和相应的用户界面可以完成各种专门的设计。开发一个应用软件则只要从算法、数据结构、用户界面、数据管理四个方面去设计，相应的程序实现则可以由通用的功能模块实现。

### 2.4.3.3 数据库管理软件与工程数据库

在 CAD 系统中，几乎所有的应用软件都离不开数据库。提高 CAD 系统的集成化程度主要取决于数据库的水平。以前许多实用的 CAD 系统，尤其是规模不大的系统，其图形及几何数据的管理，都采用文件系统。文件系统使用方便、代价小、效率高，它是 60 年代最为普遍的数据管理方法。但是它的缺点也很明显：数据不集中，这就难以保证数据的一致性；数据不能共享、不能支持多用户使用；数据不独立，如果程序逻辑结构改变，将影响到存储结构的改变，反之亦然。

随着 CAD 系统日趋扩大，信息量增加，信息内容复杂，正逐步采用数据库来管理数据，并进一步提出数据库管理系统。市场上商用的数据库管理系统，不能满足建立工程数据库的要求。这时由于工程数据库除常用的字符、数值信息外，还有文字、图形等信息，而且数据量大，使用中有时处于运动状态，要求响应快，便于图形终端前作交互设计。

## 2.5 本章小结

本章介绍了器件模拟的基本方法，并且介绍了器件模拟的数学、物理、计算机的三个方面的基本知识。为下面的实际软件的编制打下基础，我们选用数值分析的方法，通过计算机求解半导体器件的基本方程，然后结合工艺参数，进行算法设计，

和软件设计工作。

## 第三章 半导体器件模拟算法分析

### 3.1 概述

本章我们运用前面的知识前面章节描述的器件模拟的数学、物理和计算机基础，对基本半导体器件的一维方程，进行分析，设计出主要的算法<sup>[16]</sup>。这些方程的数值解的方法相应的可以推广到二维和三维的器件数值模拟上去，是半导体器件数值模拟最基本也是最重要的部分。

### 3.2 PN 结二极管的模拟

#### 3.2.1 基本方程及边界条件

在结性半导体器件中，PN 结二极管的结构是其它大部分器件的基础，从数值模拟的观点看，它也是最基本的模拟对象。PN 结二极管的数值模拟方法可以应用于其它半导体器件，如双极型晶体管、MOSFET、半导体传感器等<sup>[17,18,19]</sup>。

首先我们讨论 PN 结器件的一维模拟。图 3.1 给出了 PN 结二极管的一维结构。在这种结构中，掺杂浓度是坐标  $x$  的函数，即

$$N(x) = N_d(x) - N_a(x) \quad (3.1)$$

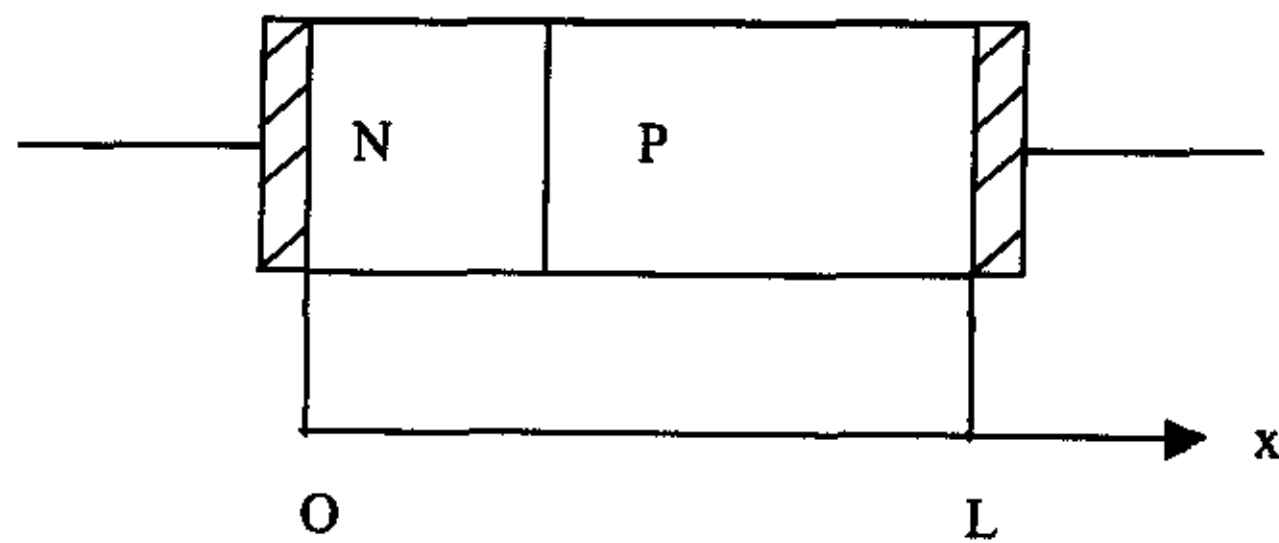


图 3.1 PN 结二极管的一维结构

根据下述假设：

- (1) 半导体材料满足非简并条件，载流子浓度由玻耳兹统计分布决定。
- (2) 在  $0 \sim L$  内半导体的温度是一常数。
- (3) 杂质全部电离。



PN 结器件的模型方程可以表示为

$$J_n = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} - q\mu_n n \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.2)$$

$$J_p = qD_p \frac{\partial p}{\partial x} - q\mu_p p \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} + G - R \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\epsilon} (N + p - n) \quad (3.6)$$

$$J = J_n + J_p + \epsilon \frac{\partial E_l}{\partial t} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (3.8)$$

式中 (3.8) 是广义电流连续条件。式 (3.2) — (3.8) 中各量的含义在第二章中已经给出。

一般情况下, 方程 (3.4), (3.5) 中的载流子产生—复合项仅需计入最有效的 SRH 复合, 这时复合率  $R$  为

$$R = \frac{pn - n_i^2}{\tau_n(n + n_i) + \tau_p(p + p_i)} \quad (3.9)$$

如果器件偏置在相当高的反偏电压下, 载流子碰撞离化效应显著, 载流子产生复合项还必须计入雪崩产生。实际中, 为满足对器件提出的大功率、高击穿电压的要求, 某些二极管采用了电阻率很高的高阻材料, 这类器件工作时高阻区将储存大量的电子和空穴, 俄歇复合将严重影响器件的性能。对于这类器件还应该计入俄歇复合。

在方程 (3.2) — (3.8) 中, 各物理量的数值变化范围通常很大。为了能可靠地进行半导体器件的数值模拟, 保证计算过程中不至于因数据过高或者过低而发生“溢出”现象, 需要将模型方程中的物理量除以适当的比例常数。这个过程被称为归一化, 相应的比例常数被称为归一化因子。归一化因子的选取有一定任意性, 只要能保证模型方程成立就行。这里我们采用一种常用的归一化因子选取方法。

不考虑方程的维数, 将所有的空间坐标除以本征拜德长度  $L_D$ , 换句话说, 空间坐

标都以  $L_D$  为单位:

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon k T}{q^2 n_i}} \quad (3.10)$$

类似地, 载流子浓度、掺杂浓度以本征载流子浓度  $n_i$  为单位, 电位、费米势以热电压  $V_i(kT/q)$  为单位, 其它各量依次类推。

经过归一化处理后, 一维半导体器件模型方程为

$$J_n = -\mu_n \left[ n \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial n}{\partial x} \right] = -\mu_n n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \quad (3.11)$$

$$J_p = -\mu_p \left[ n \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} \right] = -\mu_p n \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} + G - R \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -(N + p - n) \quad (3.15)$$

$$J = J_n + J_p + \frac{\partial E_l}{\partial t} \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (3.17)$$

考虑边界条件。在欧姆接触处, 载流子浓度满足电中性和热平衡关系, 即有:

$$N(0) + p(0) - n(0) = 0 \quad N(L) + p(L) - n(L) = 0 \quad (3.18)$$

$$p(0)n(0) = 1 \quad p(L)n(L) = 1 \quad (3.19)$$

由式(3.18)和(3.19), 可以得到

$$n(0) = \frac{N(0)}{2} \left\{ 1 + \left[ 1 + \left( \frac{2}{N(0)} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad p(0) = \frac{1}{p(L)} \quad (3.20)$$

$$p(L) = \frac{N(L)}{2} \left\{ 1 + \left[ 1 + \left( \frac{2}{N(L)} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad n(L) = \frac{1}{p(L)} \quad (3.21)$$

在不很高地温度下, 半导体地本征激发还未起作用, 有  $1/N(0) \ll 1$  ,  $1/N(L) \ll 1$  所以

$$n(0) = N(0) \quad p(L) = -N(L) \quad (3.22)$$

这是杂质全部电离的情况。上述边界条件与时间无关。

### 3.2.2 PN 结器件的一维稳态数值模拟

#### 3.2.2.1 方程的离散处理

在稳态状况下，模型方程中相对于时间的偏导数为零。考虑偏置电压不很高，产生项可以忽略不计，方程 (3.13) 和 (3.14) 转变为

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} = R \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} = -R \quad (3.24)$$

在边界上，由定义

$$\phi_n(0) = \phi_p(0) = 0 \quad (3.25)$$

$$\phi_n(L) = \phi_p(L) = V_A \quad (3.26)$$

并代入电位与准费米势的关系式：

$$\begin{aligned} \varphi &= \phi_p - \ln p \\ \varphi &= \phi_n + \ln n \end{aligned} \quad (3.27)$$

可以得到

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \ln n(0) \\ \varphi(L) &= V_A - \ln p(L) \end{aligned} \quad (3.28)$$

式中  $V_A$  是施加在 PN 结器件两端的电压。

方程(3.11)、(3.12)、(3.15)、(3.23)、(3.24)和边界条件(3.20)、(3.21)、(3.28)构成了 PN 结器件的两点边值问题，基本求解变量是载流子浓度  $n$ 、 $p$  和电位  $\varphi$ 。

采用差分方法进行离散处理。在一维空间  $0-L$  内进行如图 3.2 所示的网格划分，并引入“中线网格”，即在  $K=1$  至  $K=N$  的  $N$  格点中，每个格点的中点设置一个中线网格点，中线网格点从 1 变化到  $N-1$ 。格点间距选取遵循如下原则：在掺杂浓度变化陡峭区和 PN 结耗尽区选择较细的网格，而在中性区，间距可以适当取大。根据这种网格划分，在中线网格点上计算各物理量地导数。在原始网格点上计算变量  $n$ 、 $p$  和  $\varphi$  的值。这种网格嵌套技术有利于提高差分近似的精度，在半导体器件数值分析中常常采用这种技术。

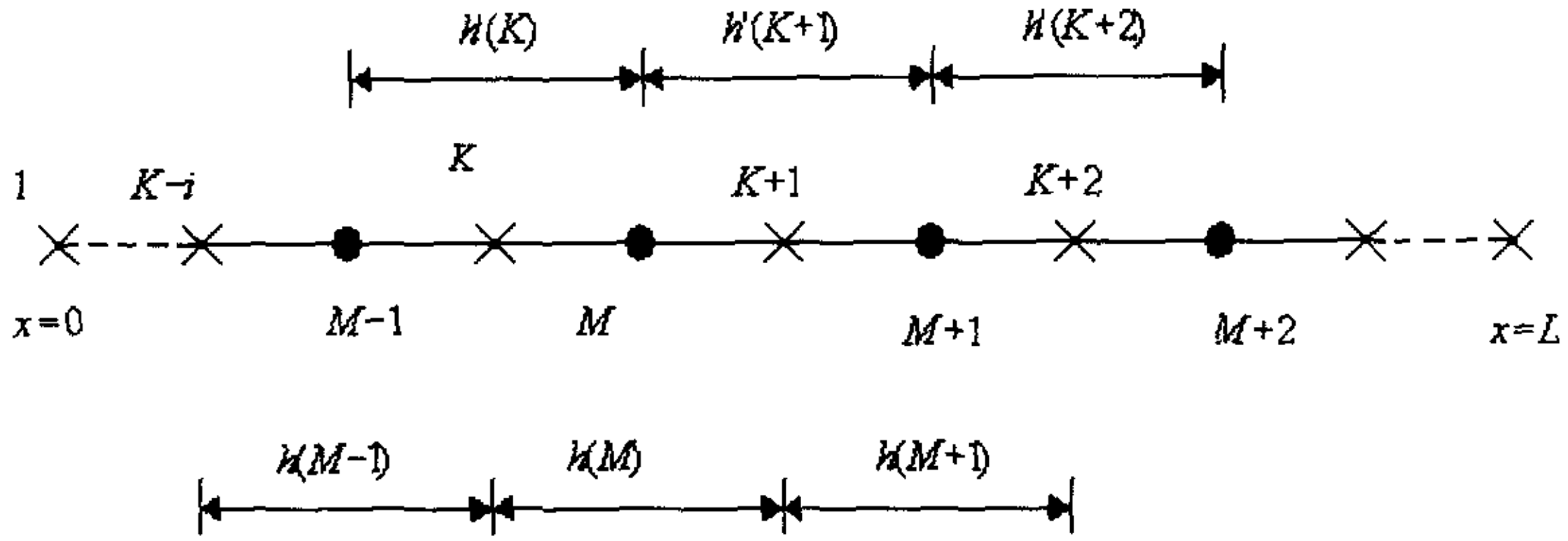


图 3.2 网格划分图

下面推导方程 (3.11)、(3.12)、(3.15)、(3.23)、(3.24) 的差分形式。按照通常的差分方法, 式 (3.11) 的差分形式为

$$J_n(M) = -\mu_n(M)n(M)\frac{\varphi(K+1) - \varphi(K)}{h(M)} + \mu_n(M)\frac{n(K+1) - \varphi nK}{h(M)} \quad (3.29)$$

注意到上式中的  $n(M)$  值必须用相邻的原始格点  $K$ 、 $K+1$  上的  $n$  值来表示, Scharfetter 和 Gummel 提出如下办法解决这一问题: 认为在格点  $K$  和  $K+1$  之间, 电场、迁移率、电流密度的变化可以忽略, 这样 (3.11) 可以转化为

$$\frac{dn}{dx} + nE_i - \frac{J_n}{\mu_n} = 0 \quad (3.30)$$

以格点  $K$  为原点, 解上述一阶线性常系数微分方程, 得到

$$n(x) = n(0)\exp(-E_i x) + \frac{J_n}{\mu_n E_i} [1 - \exp(-E_i x)] \quad (3.31)$$

重新回到图 3.1 所示的坐标系, 则有

$$n(K+1) = n(K)\exp[\varphi(K+1) - \varphi(K)] - \frac{J_n(M)h(M)}{\mu_n[\varphi(K+1) - \varphi(K)]} \times \{1 - \exp[\varphi(K+1) - \varphi(K)]\} \quad (3.32)$$

整理上式可以得到电子的电流密度方程离散为:

$$\begin{aligned} J_n(M) &= \frac{\mu_n(M)}{\mu_n E_i} [1 - \exp(-E_i x)] \\ &\times \{\exp[\varphi(K) - \varphi(K+1)] - 1\}^{-1} \\ &\times \{n(K+1)\exp[\varphi(K) - \varphi(K+1)] - n(K)\} \end{aligned} \quad (3.33)$$

类似的可以得到空穴的电流密度方程离散为

$$\begin{aligned}
J_p(M) &= \frac{\mu_p(M)}{h(M)} [\varphi(K) - \varphi(K+1)] \\
&\times x \{ \exp[\varphi(K) - \varphi(K+1)] - 1 \}^{-1} \\
&\times x \{ p(K) \exp[\varphi(K) - \varphi(K+1)] - p(K+1) \}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

很容易的写出电子电流连续性方程和空穴电流连续性方程的差分形式为

$$\frac{J_n(M) - J_n(M-1)}{h'(K)} - R(K) = 0 \tag{3.35}$$

$$\frac{J_p(M) - J_p(M-1)}{h'(K)} - R(K) = 0 \tag{3.36}$$

其中

$$R(K) = \frac{p(K)n(K) - 1}{\tau_n[n(K) + 1] + \tau_p[p(K) + 1]} \tag{3.37}$$

$$h'(K) = \frac{1}{2} [h(M) + h(M-1)] \tag{3.38}$$

另外，泊松方程也很容易由通常的差分方法离散为

$$\frac{1}{h'(K)} \left[ \frac{\varphi(K+1) - \varphi(K)}{h(M)} - \frac{\varphi(K) - \varphi(K-1)}{h(M-1)} \right] = -[p(K) - n(K) + N(K)] \tag{3.39}$$

方程 (3.33) —— (3.39) 便构成了一维 PN 结器件的差分形式。

### 3.2.2.2 线性化方法及求解技术

#### 1. 差分方程的线性化处理<sup>[20,21]</sup>

如果将电流密度的差分式 (3.33) 代入 (3.35)，将空穴电流密度的差分式 (3.34) 代入式 (3.36)，并与泊松方程的差分式联立，则得到其一般形式为

$$F_n[n(K-1), n(K), n(K+1), p(K), \varphi(K-1), \varphi(K), \varphi(K+1)] = 0 \tag{3.40}$$

$$F_p[n(K), p(K-1), p(K), p(K+1), \varphi(K-1), \varphi(K), \varphi(K+1)] = 0 \tag{3.41}$$

$$F_\varphi[n(K), p(K), \varphi(K-1), \varphi(K), \varphi(K+1)] = 0 \tag{3.42}$$

式中函数  $F_n$ 、 $F_p$ 、 $F_\varphi$  分别对应于电子连续性方程、空穴连续性方程和泊松方程的差分形式。由于  $J_n$ 、 $J_p$  和  $R$  的非线性， $F_n$  函数和  $F_p$  函数也是非线性的，这给我们求解方程 (3.40) —— (3.42) 构成的高阶方程组带来了困难，所以必须将这些方程线性化。将函数  $F_n$ 、 $F_p$  在  $n_0$ 、 $p_0$ 、 $\varphi_0$  处进行泰勒展开，并忽略二次以上的高次项，有

$$\begin{aligned}
& F_n^0 + \frac{\partial F_n}{\partial n(K-1)} \Delta n(K-1) + \frac{\partial F_n}{\partial n(K)} \Delta n(K) + \frac{\partial F_n}{\partial n(K+1)} \Delta n(K+1) \\
& + \frac{\partial F_n}{\partial p(K)} \Delta p(K) + \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K-1)} \Delta \varphi(K-1) + \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K)} \Delta \varphi(K) \\
& + \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K+1)} \Delta \varphi(K+1) = 0
\end{aligned} \tag{3.43}$$

$$\begin{aligned}
& F_p^0 + \frac{\partial F_p}{\partial n(K)} \Delta n(K) + \frac{\partial F_p}{\partial p(K-1)} \Delta p(K-1) + \frac{\partial F_p}{\partial p(K)} \Delta p(K) \\
& + \frac{\partial F_p}{\partial p(K+1)} \Delta p(K+1) + \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K-1)} \Delta \varphi(K-1) + \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K)} \Delta \varphi(K) \\
& + \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K+1)} \Delta \varphi(K+1) = 0
\end{aligned} \tag{3.44}$$

尽管  $F_\varphi$  是线性函数，为统一起见，也进行泰勒展开，有

$$\begin{aligned}
& F_\varphi^0 + \frac{\partial F_\varphi}{\partial n(K)} \Delta n(K) + \frac{\partial F_\varphi}{\partial p(K)} \Delta p(K) + \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K-1)} \Delta \varphi(K-1) \\
& + \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K)} \Delta \varphi(K) + \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K+1)} \Delta \varphi(K+1) = 0
\end{aligned} \tag{3.45}$$

这里  $F_n^0$ 、 $F_p^0$ 、 $F_\varphi^0$  分别对应于变量  $n_0$ 、 $p_0$ 、 $\varphi_0$  的  $F_n$ 、 $F_p$ 、 $F_\varphi$  的函数值。

进一步还可以将上述方程整理成统一的矩阵形式：

$$\begin{aligned}
& \begin{vmatrix} \frac{\partial F_n}{\partial n(K-1)} & 0 & \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K-1)} \\ 0 & \frac{\partial F_p}{\partial p(K-1)} & \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K-1)} \\ 0 & 0 & \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K-1)} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Delta n(K-1) \\ \Delta p(K-1) \\ \Delta \varphi(K-1) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \frac{\partial F_n}{\partial n(K)} & \frac{\partial F_n}{\partial p(K)} & \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K)} \\ \frac{\partial F_p}{\partial n(K)} & \frac{\partial F_p}{\partial p(K)} & \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K)} \\ \frac{\partial F_\varphi}{\partial n(K)} & \frac{\partial F_\varphi}{\partial p(K)} & \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K)} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Delta n(K) \\ \Delta p(K) \\ \Delta \varphi(K) \end{vmatrix} \\
& + \begin{vmatrix} \frac{\partial F_n}{\partial n(K+1)} & 0 & \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K+1)} \\ 0 & \frac{\partial F_p}{\partial p(K+1)} & \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K+1)} \\ 0 & 0 & \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K+1)} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Delta n(K+1) \\ \Delta p(K+1) \\ \Delta \varphi(K+1) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -F_n^0 \\ -F_p^0 \\ -F_\varphi^0 \end{vmatrix}
\end{aligned} \tag{3.46}$$

其中矩阵下标“0”表示所有的矩阵元是在  $n_0$ 、 $p_0$  和  $\varphi_0$  处的偏导数。各矩阵元可利用式 (3.33) —— (3.39) 导出，例如对应于泊松方程，有



$$\frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K-1)} = \frac{1}{h(M-1)h'(K)}$$

$$\frac{\partial F_\varphi}{\partial n(K)} = -1 \quad \frac{\partial F_\varphi}{\partial p(K)} = 1 \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K)} = -\frac{1}{h'(K)} \left[ \frac{1}{h(M)} + \frac{1}{h(M-1)} \right] \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K+1)} = -\frac{1}{h(M)h'(K)} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} F_\varphi^0 = & [N(K) + p_0(K) - n_0(K)] + \frac{1}{h'(K)h(M)} \varphi_0(K+1) \\ & + \frac{1}{h'(K)h(M-1)} \varphi_0(K-1) - \frac{1}{h'(K)} \left[ \frac{1}{h(M)} + \frac{1}{h(M-1)} \right] \varphi_0(K) \end{aligned} \quad (3.50)$$

其它各矩阵元可类似推导出。为简洁起见，可将除边界点外的所有网格点处的方程 (3.46) 写成矩阵矢量的形式：

$$P(K)\Delta T(K-1) + Q(K)\Delta T(K) + W(K)\Delta T(K+1) = H(K) \quad 2 \leq K \leq N'-1 \quad (3.51)$$

其中

$$P(K) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_n}{\partial n(K-1)} & 0 & \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K-1)} \\ 0 & \frac{\partial F_p}{\partial p(K-1)} & \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K-1)} \\ 0 & 0 & \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K-1)} \end{vmatrix} \quad (3.52)$$

$$Q(K) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_n}{\partial n(K)} & \frac{\partial F_n}{\partial p(K)} & \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K)} \\ \frac{\partial F_p}{\partial n(K)} & \frac{\partial F_p}{\partial p(K)} & \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K)} \\ \frac{\partial F_\varphi}{\partial n(K)} & \frac{\partial F_\varphi}{\partial p(K)} & \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K)} \end{vmatrix} \quad (3.53)$$

$$W(K) = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_n}{\partial n(K+1)} & 0 & \frac{\partial F_n}{\partial \varphi(K+1)} \\ 0 & \frac{\partial F_p}{\partial p(K+1)} & \frac{\partial F_p}{\partial \varphi(K+1)} \\ 0 & 0 & \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi(K+1)} \end{vmatrix} \quad (3.54)$$

$$H(K) = \begin{vmatrix} -F_n^0 \\ -F_p^0 \\ -F_\varphi^0 \end{vmatrix} \quad \Delta T(K) = \begin{vmatrix} \Delta n(K) \\ \Delta p(K) \\ \Delta \varphi(K) \end{vmatrix} \quad (3.55)$$

由边界条件,  $n$ 、 $p$  和  $\varphi$  在端点  $K=1$  和  $K=N'$  处均为指定的值, 于是  $\Delta T(1) = \Delta T(N') = 0$ 。现在的问题是求解线性方程组 (3.51)

### 3.2.2.3 线性方程组的求解

将子矩阵  $P$ 、 $Q$ 、 $W$  看作矩阵元, 则线性方程组 (3.51) 可以记为

$$\begin{vmatrix} Q(2) & W(2) & \dots & \dots & \dots & 0 \\ P(3) & Q(3) & W(3) & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & P(N'-2) & Q(N'-2) & W(N'-2) \\ 0 & \dots & \dots & \dots & P(N'-1) & Q(N'-1) \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \Delta T(2) \\ \Delta T(3) \\ \vdots \\ \Delta T(N'-2) \\ \Delta T(N'-1) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} H(2) \\ H(3) \\ \vdots \\ H(N'-2) \\ H(N'-1) \end{vmatrix} \quad (3.56)$$

该系数矩阵具有块三对角特性, 是带形矩阵的一种特殊情况, 可以利用这一特点运用追赶法求解<sup>[22]</sup>。

将方程 (3.56) 用下列形式表示

$$Z\Delta T = H \quad (3.57)$$

由  $LU$  分解法, 有

$$LU\Delta T = H \quad (3.58)$$

$$U\Delta T = L^{-1}H \quad (3.59)$$

今  $H' = L^{-1}H$ , 由式 (3.59), 有

$$U_1(K)\Delta T(K) + U_2(K)\Delta T(K+1) = H'(K) \quad (3.60)$$

即

$$\Delta T = U_1^{-1}(K)H'(K) - U_1^{-1}(K)U_2(K)\Delta T(K+1) \quad (3.61)$$

将上式代入式 (3.51), 消去  $\Delta T(K-1)$ , 并与式 (3.60) 比较, 得到

$$U_1(K) = Q(K) - P(K)U_1^{-1}(K-1)U_2(K-1) \quad (3.62)$$

$$U_2(K) = W(K) \quad (3.63)$$

$$H'(K) = H(K) - P(K)U_1^{-1}(K-1)H'(K-1) \quad (3.64)$$

由于  $\Delta T(1) = 0$ , 在  $K=2$  时, 可以直接比较 (3.51) 与式 (3.60) 得到

$$U_1(2) = Q(2) \quad U_2(2) = W(2) \quad H'(2) = H(2) \quad (3.65)$$

这样, 从式 (4.65) 开始, 根据递推关系式 (3.62) —— (3.64), 依次序

$K = 3, 4, \dots, N'-1$ , 定出  $U_1(K)$ 、 $U_2(K)$ 、 $H'(K)$ 。事实上, 由于式 (3.62) —— (3.64) 中各量是  $3 \times 3$  阶的矩阵,  $U_1(K)$  的逆矩阵可以直接从递推得到的  $U_1(K)$  定出, 所以该递推过程仅涉及到  $3 \times 3$  阶矩阵的运算, 计算比较方便。

获得  $U_1(K)$ 、 $U_2(K)$  和  $H'(K)$  后, 再根据式 (3.61) 由  $\Delta T(N') = 0$ , 按照  $K = N'-1, N'-2, \dots, 2$  的顺序计算出  $\Delta T(K)$ 。实际上, 这是块三对角矩阵的追赶法和三阶子矩阵直接求解法的结合。

### 3.2.3 PN 结器件的一维瞬态数值模拟

瞬态情况得微分方程组由式 (3.11) —— (3.15) 给出, 初始条件由  $n(x,0)$ 、 $p(x,0)$  和  $\varphi(x,0)$  给出。如果初始状态是一个稳定状态, 则变量得初始分布可以从相应得稳定解得到<sup>[23,24,25]</sup>。

与稳定状态相比, 瞬态模型方程除了边界条件外还有一个常由外部激励来确定得外部条件。对于 PN 结器件来说得瞬态工作模式可以分为三类: 电压源激励, 即加再器件两端得偏置电压  $V_A(t)$  由外接电压源决定; 另一类是电流源激励, 即通过单位截面积得电流  $J(t)$  由外接电流源决定, 这时 PN 结器件两端得等效偏置电压由

$$V_A(t) = - \int_0^L E_l(x,t) dx + V_{bi} \quad (3.66)$$

给出, 式中  $V_{bi}$  是 PN 结自建电场,  $E_l(x,t)$  是电场分布; 第三类就是外部电路给出端点电压  $V_A(t)$  和端点电流  $J(t)$  的关系。这三种模式之间有一定的关系: 一旦确定了某一模式下的器件数值模拟方法, 其它模式下的解就可以由该模式下的数值模拟结果得到。

下面我们讨论电压源激励得瞬态模拟方法。重记模型方程如下:

$$J_n = -\mu_n \left[ n \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial n}{\partial x} \right] \quad (3.67)$$

$$J_p = -\mu_p \left[ n \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} \right] \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial J_n}{\partial x} - R \quad (3.69)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} - R \quad (3.70)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -(N + p - n) \quad (3.71)$$

这里忽略了载流子产生项，如果计入产生项，仅需将  $R-G$  代替  $R$ ，下面得到的结论仍然适用。显然，由于模型方程计入了时间项，对于这类初值边值的问题，差分离散方法必须要特别满足稳定性和收敛性的要求。

可以证明，隐式的离散方法满足线性方程无条件稳定和收敛的要求。隐式离散方法指将与时间有关的模型方程：

$$\frac{\partial Y(x,t)}{\partial t} = F(x,t) \quad (3.72)$$

离散为下述方式：

$$\frac{Y(i,j) - Y(i,j-1)}{\tau_j} = \theta F(i,j) + (1-\theta)F(i,j-1) \quad (3.73)$$

$(i = 1, 2, \dots, M')$

其中  $\theta$  是一个由离散方案类型决定的参数，一般选作  $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$ ，如果  $\theta = 1$  称为全隐

式方法， $\theta = \frac{1}{2}$  称为 Crank-Nicolson 方法。

采用 Crank-Nicolson 方法，我们可以得到 (3.69) 和 (3.70) 的差分格式：

$$\begin{aligned} \frac{n(i,j) - n(i,j-1)}{\tau_j} = & \frac{1}{2} \left[ \frac{J_n(M,j) - J_n(M-1,j)}{h'(M)} - R(i,j) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left[ \frac{J_n(M,j-1) - J_n(M-1,j-1)}{h'(M)} - R(i,j-1) \right] \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} \frac{n(i,j) - n(i,j-1)}{\tau_j} = & -\frac{1}{2} \left[ \frac{J_p(M,j) - J_p(M-1,j)}{h'(M)} - R(i,j) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left[ \frac{J_p(M,j-1) - J_p(M-1,j-1)}{h'(M)} - R(i,j-1) \right] \end{aligned} \quad (3.75)$$

注意到上述方程是非线性的，将电子和空穴电流密度的差分形式代入上面两式，经过泰勒展开忽略二次以上的高次项类似稳态模拟得到矩阵矢量方程式：

$$\begin{aligned} P_i(i,j)\Delta T(i-1,j) + Q_i(i,j)\Delta T(i,j) + W_i(i,j)\Delta T(i+1,j) = \\ H_i(i,j) \quad 2 \leq i \leq N'-1 \quad j \text{ 给定} \end{aligned} \quad (3.76)$$

下面的数学处理与稳态完全相同，在进行牛顿迭代反复求解矩阵矢量方程。

### 3.3 本章小结

本章描述了用数值分析方法求解 PN 结器件方程的算法过程,重点介绍了一维稳态的数值模拟,其基本过程就是通过把 PN 结基本方程组化成差分的形式,然后通过泰勒分解去掉高次项,得到一个矩阵矢量方程式,最后采用牛顿迭代的方法求解这个方程式。这种方法可以比较方便的应用于其它半导体器件的数值模拟中。

## 第四章 半导体器件模拟软件设计

### 4.1 概述

集成电路计算机辅助设计（CAD）已经成为集成电路发展的支柱，是大规模（LSI）和超大规模集成电路（VLSI）设计必不可少的工具。它再缩短设计周期，减少资源耗费，提高器件性能，加速开发过程等方面将起着重要的作用。集成电路计算机辅助设计（CAD）通常包括工艺模拟，器件模拟，电路模拟，布局等环节，工艺模拟用于优化工艺过程和材料性能；器件模拟用于单个器件或者器件非常少的结构紧密的单片集成电路的优化设计。本文所有的做的工作都是器件模拟方面的工作，跟工艺相关的参数我们假定已经由工艺模拟软件或者试验给出。

半导体器件模拟软件跟一般的应用软件开发设计不同，半导体器件模拟软件设计开发是一门对综合性知识要求很强的工作。不仅要具有很强的半导体器件的专业知识，也涉及到计算机图形学，数值分析，计算机软件学，软件工程学等方面的知识，所以对软件开发者的要求很强，工作量巨大。我国自主开发的 EDA 工具熊猫系统就是 17 家科研单位花了 4 年的时间才开发出来，所以器件的模拟软件系统的开发也是一项艰巨的任务，真正的实用化需要花相当的人力物力。

本章是对半导体器件分析软件的总体上的设计，相当于软件工程中，项目开发的概要设计文档<sup>[26]</sup>。

### 4.2 开发环境

#### 4.2.1 软件与硬件选择

在开发中我们选取了下面的硬件和软件环境：

➤ 硬件环境：

P3 服务器一台

P4 微机 2 台

➤ 软件环境：

服务器采用：操作系统 Windows2000 Server；数据库为 MS SQL Server 7.0；

工作站采用：操作系统 Windows 2000 Advanced



➤ 开发工具:

MS VC++ 6.0; Open GL API

## 4.2.2 开发工具说明

VC++ 是微软推出的经典的 C++开发工具, 具有图形化的开发界面, 和面向对象的特点, 其强大的开发功能不言而喻<sup>[27,28]</sup>。我们选择的 API——OpenGL 是 SGI 公司推出的专业图形加速卡的图形软件应用程序接口, 它允许程序员对 2D 和 3D 几何形体进行描述, 并绘制 (Rendering) 到帧缓存 (Frame Buffer)。它的工作方式就如同一个状态机, 你可以通过各种状态和模式设置控制绘制过程, 达到绘制要求。选择 OpenGL 的好处在于: OpenGL 作为一种新型的接口, 它具有与硬件的无关性, 使其可以在不同的硬件平台上实现, 很方便进行软件的移植。目前基于 OpenGL 开发辅助设计软件, 已经成为一种流行趋势<sup>[29,30]</sup>。

## 4.3 总体设计

### 4.3.1 系统拓扑结构

系统结构的总体拓扑结构如下图 4.1 所示, 其中应用服务器和数据库服务器可以放在同一台服务器中。这是一个典型的 C—S 结构的应用。用户可以通过瘦客户端, 连接到应用服务器, 应用服务器, 根据客户端的请求, 计算出结果, 然后返回给客户端。瘦客户端的图形解释器把结果通过图象的形式展现在用户面前。

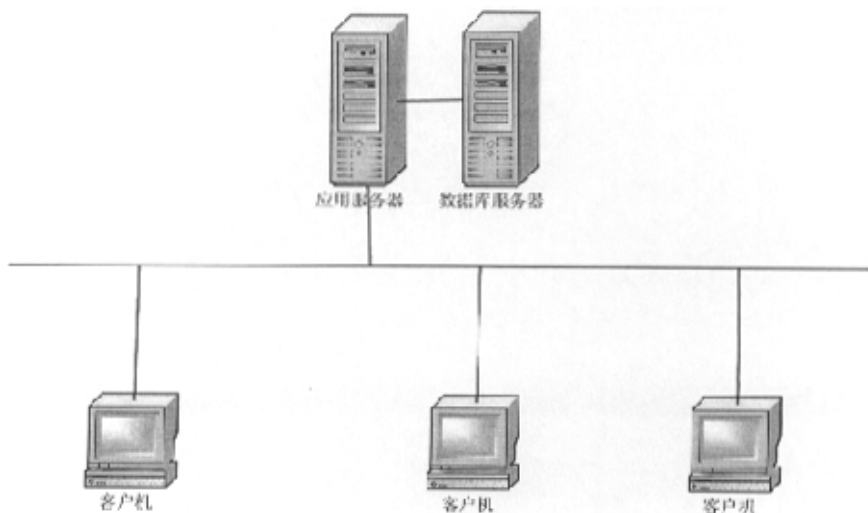


图 4.1 系统拓扑结构图

## 4.3.2 系统功能构架

系统的总体功能构架如图 4.2 所示。整个系统的功能分为三大部分：参数输入模块、核心模拟模块、结果输出模块。其中参数输入模块包括了外部参数的输入和同工艺软件的接口两个部分，结果输出模块包括了图形显示和外部数据接口两个部分。

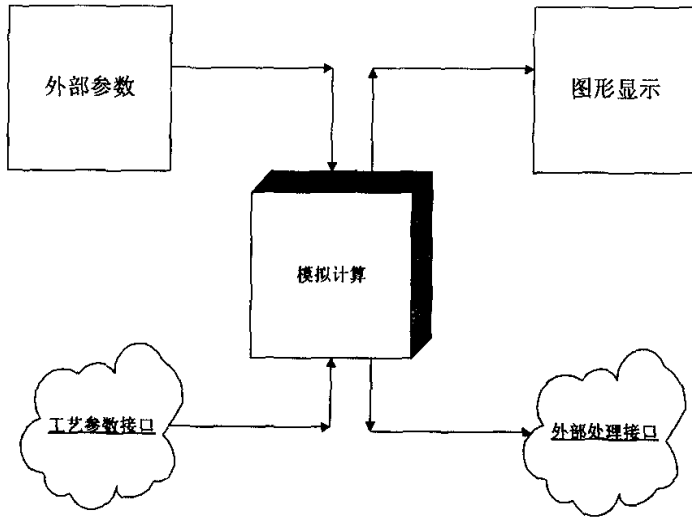


图 4.2 系统总体功能构架

## 4.3.3 功能部分设计

### 4.3.3.1 参数输入模块

参数输入这个部分，包括了数据的录入界面与工艺参数的接口两大部分。其中参数的录入提供两种形式：一种是图形界面的参数输入；另一种是文本形式的参数录入。工艺参数处理接口也提供文本输入，以及手工输入两种形式。参数输入模块功能见图 4.3

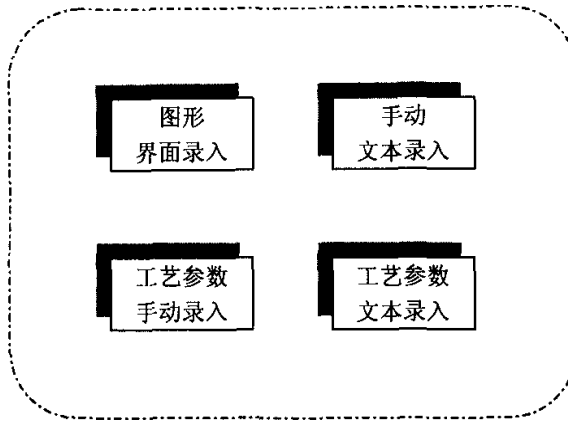
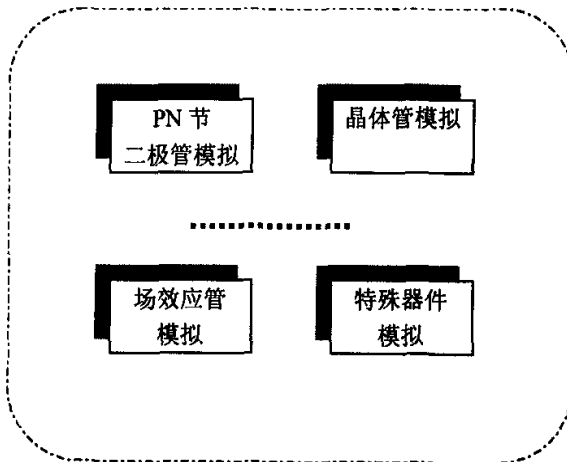


图 4.3 参数输入模块功能图

#### 4.3.3.2 核心模拟模块

核心模拟模块，是整个系统最核心的也是最关键的模块，其基本功能就是根据输入部分得到的必要的参数，采用数值分析的方法，根据相应的器件模型，用高性能的计算机计算出相应的结果。这一部分的处理能力也决定了整个系统的功能。因此这个部分可以根据系统的具体模拟功能来划分。一般可以包括：PN 节二极管模拟，晶体管模拟，场效应管模拟，特殊器件模拟等部分。同时这个核心模拟模块也叫做器件模拟器。



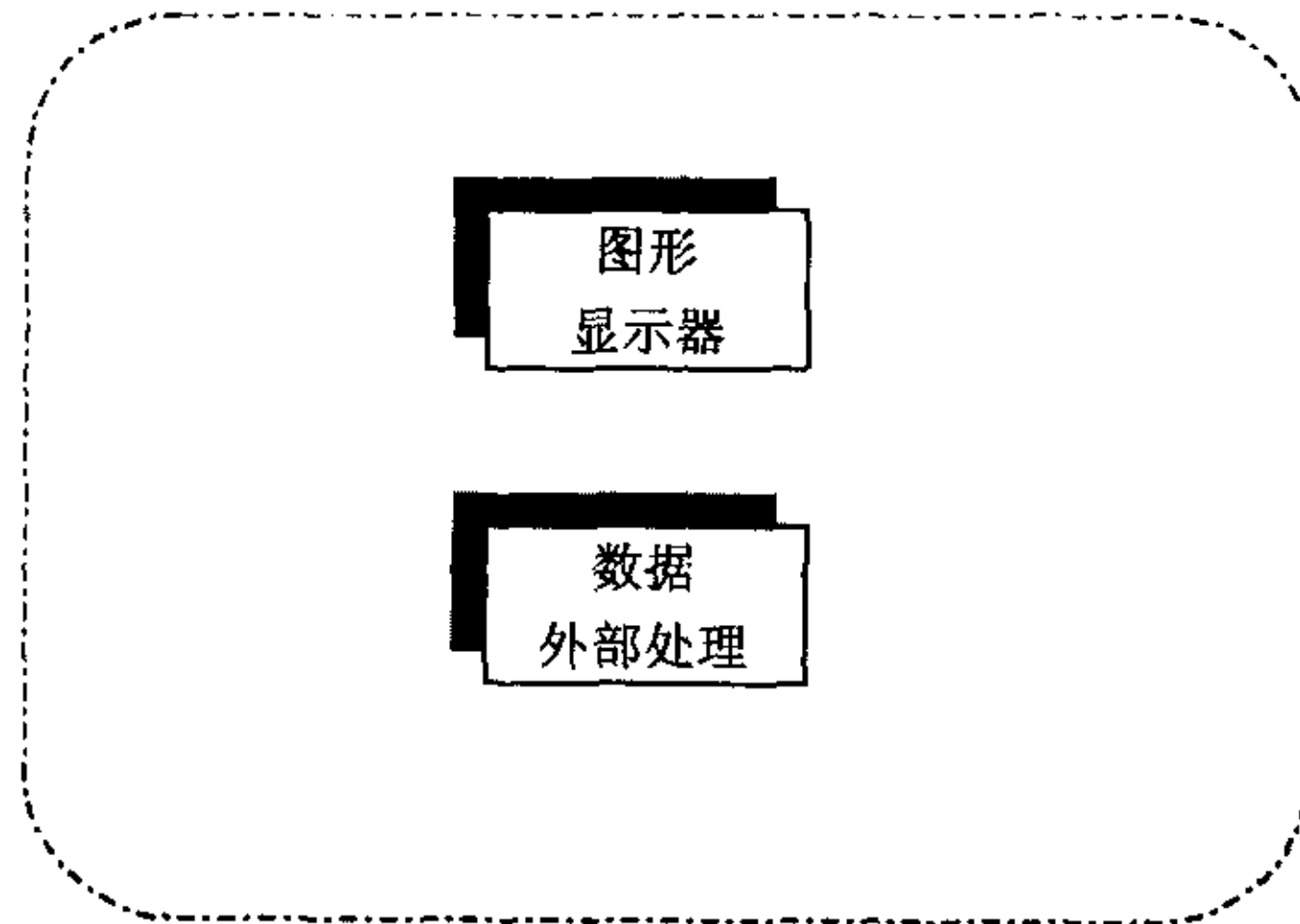
4.4 核心模拟模块功能图

同时核心模拟模块也可以根据其模拟的能力分为：一维模拟、二维模拟和三维模拟。

#### 4.3.3.3 结果输出模块

结构输出模块包括了两大部分：图形现实器和数据外部处理接口。其中图形现

实器的功能是把模拟出来的数据结果以图形的形式显示在客户端,而数据外部处理接口主要提供把模拟出的数据直接以文本形式提供给用户或者外部程序。结果输出模块功能见图 4.4



4.5 结果输出模块功能图

## 4.4 接口设计

系统软件的接口主要包括两个部分,一个是本系统与外部系统的接口,另一个是本系统内部的模块与模块之间的接口。外部接口主要提供系统与外部程序的联系,内部接口是程序内部的松耦合,这样方便程序的复用与功能扩展。

### 4.4.1 外部接口

在本文设计器件模拟软件系统的外部接口主要包括两个部分:一个是系统与外部参数相关程序(例如工艺模拟软件)之间的接口,另一个是系统计算出的结果与外部系统的接口。其中由于模拟的结构可以数据形式直接表示出来,只要定义必须的输出项与数据计算结果就可以了。比较复杂的是系统与外部程序参数相关程序的接口,这个接口的定义,相当与外部程序与本系统交流的协议,不同的器件模拟,可能需要的参数不一样,所以整个接口也随着功能的增加而扩大。在后面的软件的实现与应用的章节,我们将给出一个简单的接口协议。

### 4.4.2 内部接口

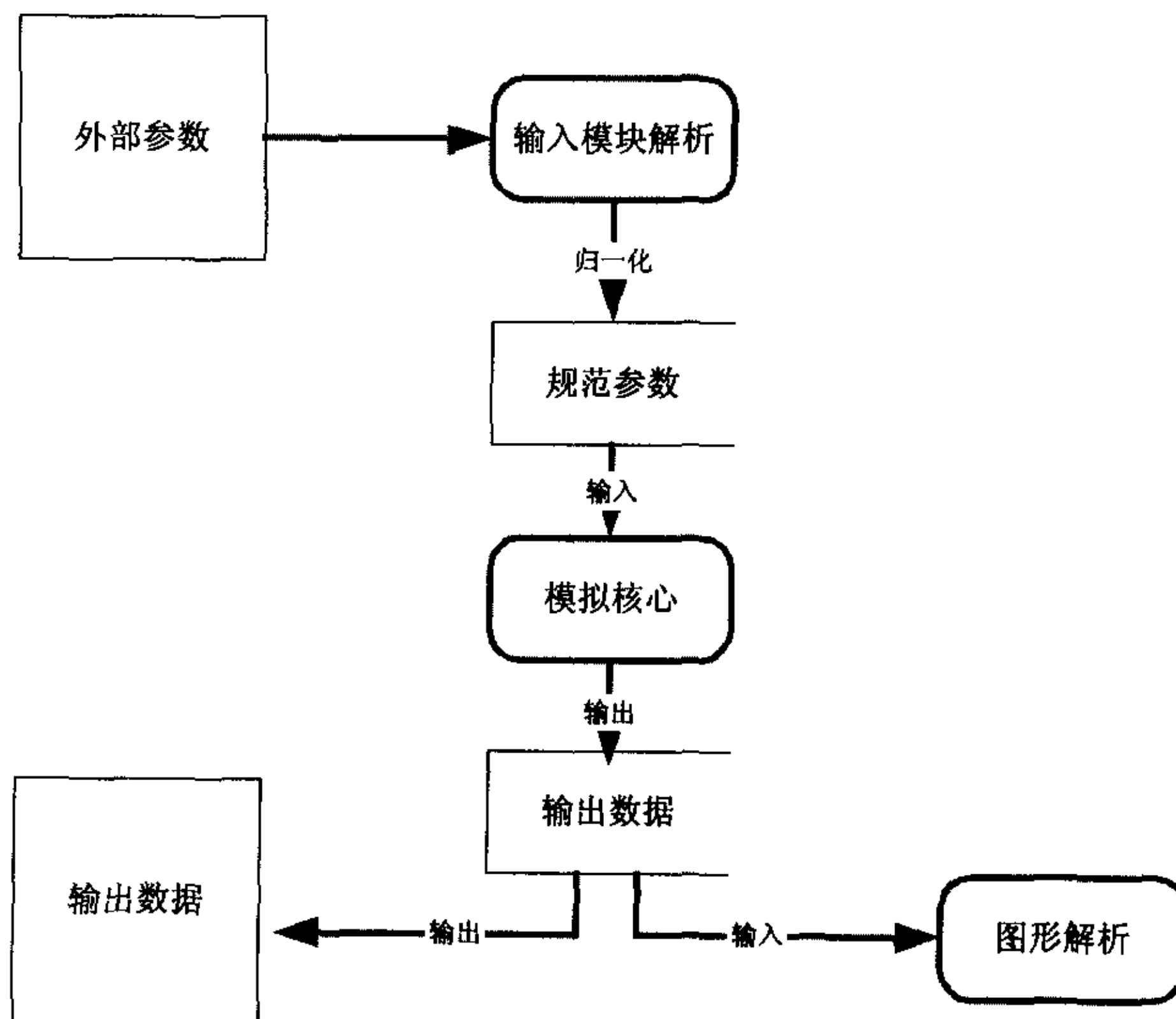
在本文设计器件模拟软件系统的内部接口也包括两个部分:参数输入模块与核心模拟模块之间的接口;核心模拟模块与结果输出模块的接口。参数输入模块提供

了图形与手工两种的输入方式，因此要统一这两种方式与核心模拟模块的接口这样，核心模拟模块可以通过统一的方式调用参数，实现模块间的通讯。核心模拟模块与结果输出模块的接口是指核心模拟模块计算出来的数据以确定的形式，传送到结果输出模块，这样输出模块可以以固定的格式解析计算机的结果，以图形或者文本的形式解都计算机结果。

## 4.5 运行设计

### 4.5.1 系统数据流程图

系统数据流程图如图 4.6 所示



4.6 系统数据流程图

### 4.5.2 系统运行流程

系统的典型运行可以包括这样的步骤：

1. 系统服务器端的启动（器件模拟核心模块启动守候进程）
2. 瘦客户端启动（包括输出模块与输出模块同时启动）
3. 用户选择需要模拟器件类型
4. 用户输入必须的参数（包括外部参数与工艺参数）

5. 用户向服务器端发出模拟请求
6. 服务器端的守候进程获得请求
7. 核心模拟器从工程数据库中提取模型
8. 核心模拟器进行模拟计算
9. 服务器端归一化计算结果
10. 服务器端向客户端传送数据
11. 瘦客户端获得数据
12. 图形显示器根据获取的数据显示图形

## 4.6 系统出错处理设计

一个系统中对错误的处理是最能体现系统健壮性的地方，也是最容易被忽视的地方。本系统的系统性错误最有可能出现的地方有如下部分。

1. 参数的归一化错误
2. 核心模拟器的逻辑错误
3. 守候进程的通讯错误
4. 图形显示器的解析错误

针对以上的错误我们采用一下的方式解决可能出现的错误。

1. 对于参数的归一化问题，我们首先是设计健壮通用的数据输入接口，对参数的单位形式等做严格的判断，尽量避免没有归一化的数据进入核心模拟器。由于有个健壮的参数录入接口，即使有部分错误，我们也可以很方便的通过修改接口达到我们的目的。
2. 核心模拟器的逻辑错误，的解决只有通过不但不的提取合适的符合实际的模型来解决。
3. 守候进程的通讯错误，最容易出现在服务器端与客户端的通讯过程中，所以在守候进程中必须添加错误处理的代码，例如：客户端通讯中断等情况，进程判断处理。
4. 图形显示器的解析错误，要通过健壮的解析模型以及图形拟合来完成。

## 4.7 系统安全策略

一个健壮的系统也必须是一个安全的系统，为保证我们系统的健壮所以我们必



须构筑自己的安全策略。本系统的安全构架主要体现在用户管理的安全、数据的安全、版权控制的安全 3 个方面<sup>[31,32,33]</sup>

### 1. 用户管理的安全

一个多用户的系统，给不同的用户赋予不同的权限是很有必要的，特别是在一个分布式的包含大型数据库的系统，由于用户对系统熟悉程度不同，我们可以根据不同的需要构筑不同的角色，然后在一定的时期把一定的角色付给用户。相对于本系统来说我们可以考虑把整个系统分为：管理员、核心用户、一般用户等角色。管理员可以进行所有的工作，核心用户可以进行数据库中模型的录入等比较复杂的工作，一般用户就只有使用部分功能的权利。我们也可以根据自己的实际需要把系统的权限细分，根据实际的需要构筑角色。用户是角色的载体，一个用户在同一时间只能是一个角色，但是如果需要在不同的时间用户可以是不同的角色。

### 2. 数据的安全

数据是系统的灵魂，所以数据的安全是一个系统的安全的最重要的地方。在一个分布式的系统中数据可能以下几个方面有安全性的隐患：数据的传输中、系统保存在数据库中、本地数据、录入或者其它形式的安全隐患。针对这些隐患我们可以采用以下措施：数据的加密传输、数据的加密数据库存储、数据的加密本地存储以及数据库的安全策略。在本系统中采用私匙 DES 加密算法<sup>[29]</sup>，即满足了系统的需要又方便实施。

### 3. 系统版权控制

由于本系统设计成为一个开放的系统，所以版权的控制包括，服务器端的版权控制以及客户端的版权控制。主要通过硬盘或者网卡的加密来实现。比如通过第一次安装时读取机器的硬盘编码，来实现对系统的版权控制。

## 4.8 系统的技术优势

本系统的设计优势主要体现在一下几个方面：

### 1. 功能模块的三重模式

本系统的三重模式：参数输入模块——核心模拟模块——结果输出模块的三重模式。把参数录入与核心模拟分开，可以方便参数录入端程序的改造，很方便的把录入界面修改成自己习惯的模式，也方便了参数录入方式的改进以及版本的转换，并且这些改变都不需要修改核心模拟以及输出模块。这样只要提供了核心模拟模块的接口，用户可以很方便的改造数据录入模块的界面，很容易实现多语言间的转换。

同理，结果输出界面跟其它两个部分分开，也可以方便图形的解析，界面的版本转换。

理论上，三个部分各自的升级或者修改，不影响其它两个模块的正常使用。实现了系统模块间的松耦合。

## 2. 服务器客户端的分布计算模式

本系统采用的服务器与瘦客户端的结构，可以实现多台客户机共享一台服务器。合理利用计算资源，把复杂的需要大量计算的器件模拟数值计算放在服务器上面，把计算量不大的参数输入以及图形解析放在客户端，最合理的利用了系统资源。

## 3. 方便扩充的核心结构

系统的核心模块采用面向对象的设计，方便功能的扩产，通过模拟函数的调用，参数的设置，很容易的实现核心模拟器功能的扩充。

## 4. 可移植跨平台的结构

由于核心模拟模块与其它部分分开，所有很容易实现多平台的匹配，把 Windows 下的程序移植到 Linux 和 Unix 下面。

## 4.9 本章小结

本章描述了整个器件模拟软件的总体结构以及功能模块。由于采用了三重模块化设计以及服务器客户端的分布计算模式，所以本系统具有扩展方便，功能独立，移植性好的等诸多特点是对单机版本的很大的改进。

## 第五章 模拟软件实现与应用

### 5.1 概述

前面章节讲了半导体器件模拟软件的总体设计，在总体的构架下面，我们针对每个功能模块进行实现设计，并且利用我们设计的半导体器件模拟软件对某些基本的半导体器件进行实际的分析。本文所做的工作是半导体器件模拟的最基本也是最重要的基本半导体器件二极管的一维模拟的数值模拟的工作，并且利用我们的系统设计以及数值模拟的基本方法，可以把工作扩展到其它半导体器件和二维三维的领域。

### 5.2 主要功能模块的实现方法

#### 5.2.1 参数录入界面的实现

系统录入界面基于参数输入与核心模拟两个模块之间的接口协议来实现。我们采用 VC++ 开发。我们采用实际方法是：根据接口协议定义的格式把图形界面录入框的参数转换成一个文本的形式提供给通讯中间件。

我们提供两种录入

图 5.1 是我们设计的界面录入的主要界面。

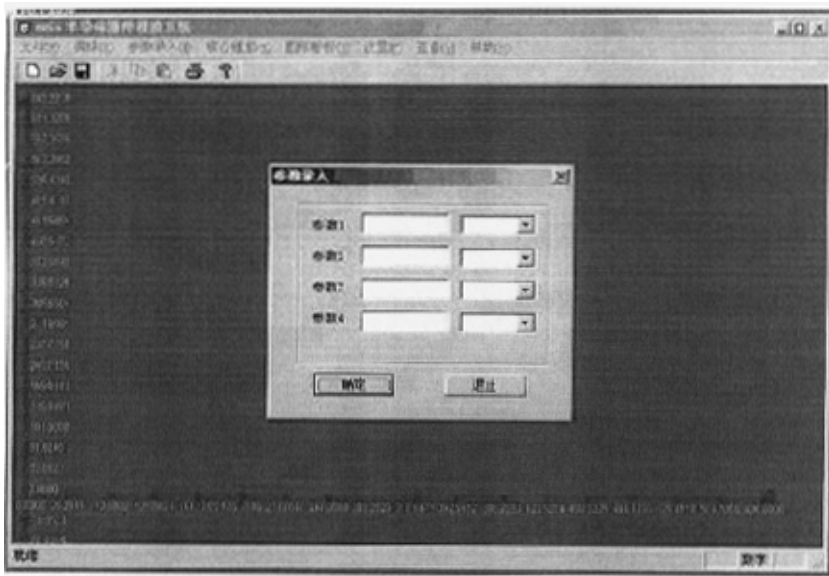


图 5.1 参数录入的主界面

### 5.2.2 参数录入的文本实现

另外我们还提供文档的导入方式，主要界面如图 5.2

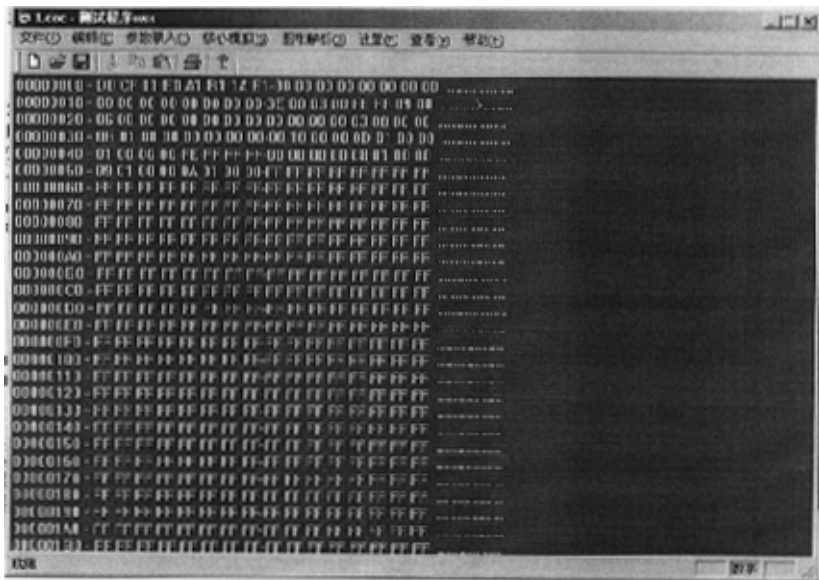


图 5.2 文本录入的主界面

### 5.2.3 参数录入中间接口的制定

中间接口是为系统的内部功能扩展以及与外部系统的通讯所制定。所以中间接口设计一定要遵循简介通用的原则。在我们做的 Demo 程序中我们把参数录入的接口设计如下：

主参数结构定义：

```
Struct CDataClass{  
    String m_szData;//主参数  
    int m_nDataType;//参数数据类型  
    String m_szDataComm;//参数备注  
    CDataClass* m_cdNext; //下个参数指针  
};
```

我们把主参数定义成一个链表的结构，这样参数的增加只要通过递归的调用功能参数来处理方便了扩展。我们把参数表定义如下：

表 5.1 参数录入接口表

描述	字段名	类型	能否为空
模拟功能类型	i_funType	int	N
工艺参数 1	User Define	CdataClass	
工艺参数 2	User Define	CdataClass	
工艺参数 3	User Define	CdataClass	
.....	.....	.....	.....
外部参数 1	User Define	CdataClass	
外部参数 2	User Define	CdataClass	
外部参数 3	User Define	CdataClass	
.....	.....	.....	.....

接口调用的方式如下：

对于不同的模拟方式功能，根据功能类型来判断，在初期可以简单直接利用功能模拟参数来判断，以后扩展可以考虑设计一个功能编码函数与一个编码识别函数来判断调用什么模拟计算函数。在判断功能类型后，然后接收参数类，通过解读参数类型，把字符型的参数转换成目标数据类型。参数的解读通过一个递归的调用来判断，这样参数个的个数可以不固定，都可以用同样的方式来处理。

## 5.2.4 核心模拟器的实现

核心模拟器，我们采用 C++ 来实现。运用面向对象的程序设计方法根据通讯中间件提供的参数，采用前面章节设计的算法来实现程序。本部分是服务器端的程序所以程序启动后必须有一个不断检测输入的进程，一旦获得客户端的计算机请求就启动计算进程。

核心模拟的计算函数我们通过一个共用的 Config 类来设置，这样功能的增加只跟这个设置类和增加的计算类有关系。程序实现的流程如下：

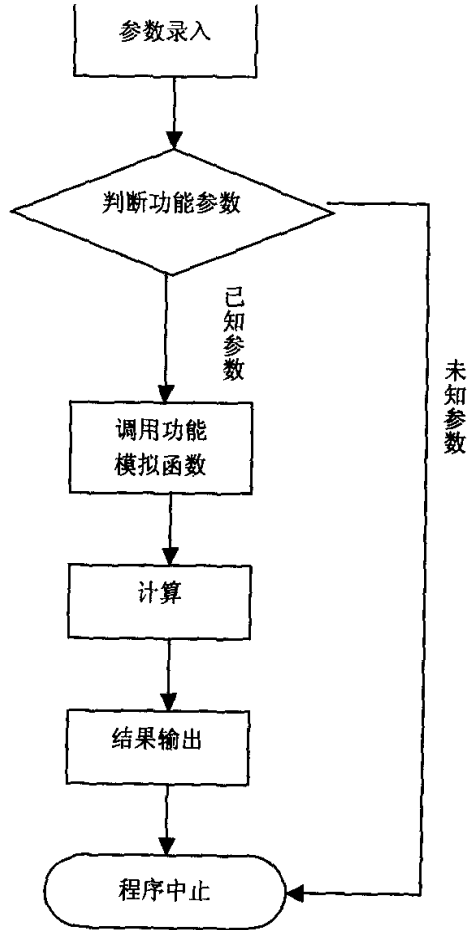


图 5.3 核心模拟流程

所有功能的增加只要增加设置功能模拟参数，增加调用的参数就可以方便的扩展。



## 5.2.5 图形解析器的实现

图形解析器基于核心模拟与图形输出两个模块之间的接口协议来实现，我们选取 VC++ 开发。图形解析器我们可以通过两种方法实现：其一就是我们让所有的计算都由核心模拟起完成计算，这样图形解析器只需要将获得的点拟合起来就可以了；另一种方法就是让解析器本身可以解析最后的结果方程式。这两种方法的主要区别就是前一种方法把所有的计算都放在服务器端，这样减少了客户端的计算量。我们选取了前一种方法开发自己的 Demo 程序<sup>[34,35,36]</sup>。

为数据点集拟合函数（线性或者非线性）的方法很多，最简单的方法就是直接的把相邻的点用直线或者抛物线拟合，比较标准的方法是最小二乘法。对于二维数据点集  $(x_k, y_k), k = 1, 2, \dots$ ，首先我们选择函数形式  $f(x)$ ，这可能是一直线函数，一个多项式函数，或者其它曲线形式，然后，我们确定每个  $x_k$  上， $f(x)$  和  $y_k$  值之间的差，并计算差值平方和：

$$E = \sum_{k=1}^n [y_k - f(x_k)]^2$$

设该函数  $f(x)$  的参数由关于  $E$  的表达式最小化确定。例如对线性函数

$$f(x) = a_0 + a_1 x$$

参数  $a_0$  和  $a_1$  是最小化  $E$  的设定值。我们通过解两个由最小化需求导出的联立线性方程来确定  $a_0$  和  $a_1$  值。即，如果关于  $a_0$  的偏导数为 0，并且关于  $a_1$  的偏导数为 0 即：

$$\frac{\partial E}{\partial a_0} = 0 \quad \frac{\partial E}{\partial a_1} = 0$$

则  $E$  是最小的。为其它函数可进行类似的计算，对于多项式

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$$

我们需要  $n$  个线性方程组，以确定参数  $a_k$  的值。而且也可以运用最小二乘法拟合几个变量的函数  $f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ ，对每一个变量而言，可以是线性的或者非线性的。

图 5.4 是本系统基本的图形输出界面：

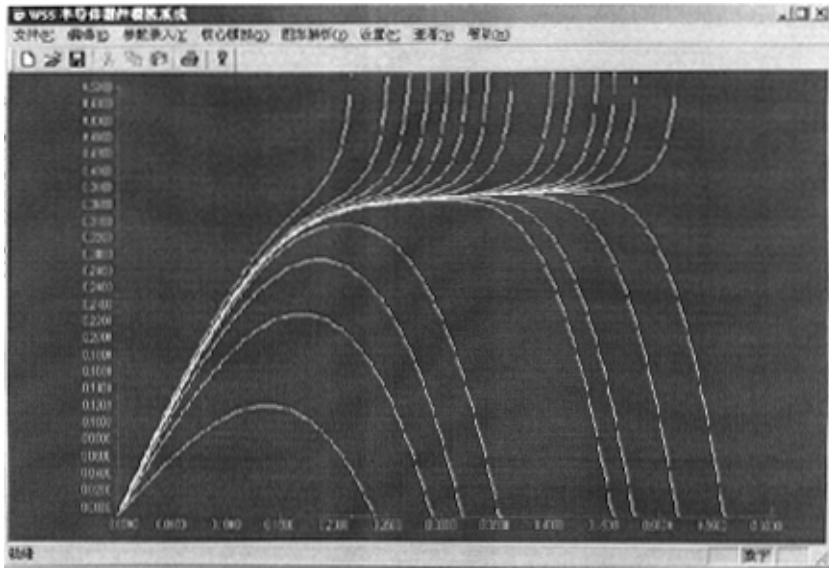


图 5.4 基本图形输出界面

### 5.2.6 系统通讯中间件的运用

中间件是一种独立的系统软件或服务程序，分布式应用软件借助这种软件在不同的技术之间共享资源<sup>[37,38]</sup>。中间件位于客户机/服务器的操作系统之上，管理计算资源和网络通讯。在器件模拟系统中，中间件运用于服务器与客户端的通讯与数据传输。这里我们可以运用 CORBA 或者 COM 来实现系统的通讯。这个通讯中间件的开发是系统实现分步试计算的关键。现有的系统中，一般的模式下如果采用 CORBA 做中间件，服务器端可以用 C++ 来开发，客户端可以用 C++ 也可以用 JAVA 做开发工具，具有很好的与平台无关性，以及可移植性。如果采用 COM 来作为中间件技术基础的话，服务器与客户端最好都用 Windows 的技术。这里我们采用 COM 来作为 Demo 版本的中间件开发的尝试。

## 5.3 部分模拟内核应用

### 5.3.1 PN 节的基本分析

实际的内核程序的编制过程中我们选取了解半导体器件的泊松方程来比较显示积分于隐式积分的计算模式的在实际应用中的优劣。

### 5.3.1.1 显示积分方法计算电势

参数如下:

$$\begin{aligned}q &= 1.6 \times 10^{-19} \text{ 库仑} & \varepsilon &= 12\varepsilon_0 = 1.064 \times 10^{-12} \text{ 法拉/厘米} \\ \theta &= q/(kT) = 3.85 \text{ 伏}^{-1} & n_i &= 1.4 \times 10^{-10} \text{ 厘米}^{-3} \\ m &= 10^{-21} \text{ 厘米}^{-4} & h &= 2 \times 10^{-7} \text{ 厘米}\end{aligned}$$

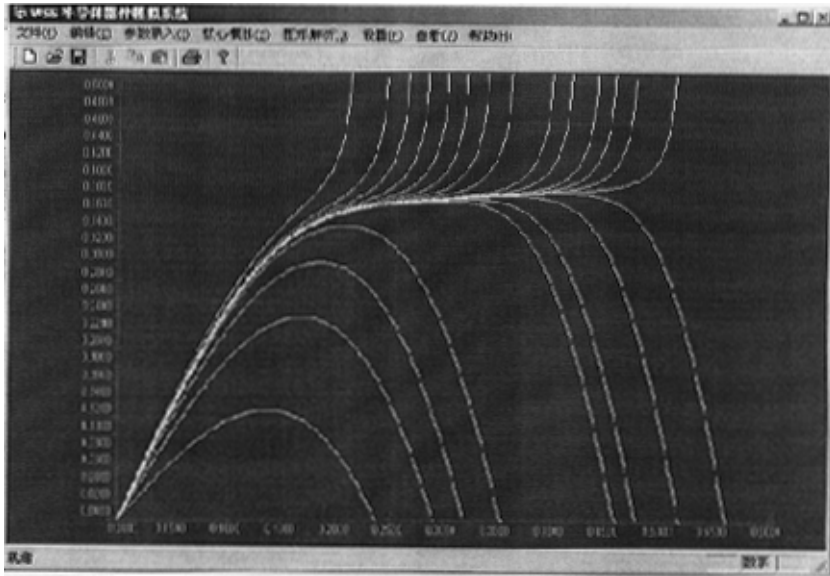


图 5.5 显示方法迭代次数计算出来的电势

我们给出的初始计算精度为 6 位数, 从图中可以看出, 即使是最好的曲线, 即最后一根曲线也在  $x = 0.55$  微米处发散。因此如果要求在一个比较大的范围不发散, 用显示积分的方法需要初始计算精度在几十位以上, 计算比较费时。

### 5.3.1.2 隐私积分方法计算电势

参数如下:

$$\begin{aligned}q &= 1.6 \times 10^{-19} \text{ 库仑} & \varepsilon &= 12\varepsilon_0 = 1.064 \times 10^{-12} \text{ 法拉/厘米} \\ \theta &= q/(kT) = 3.85 \text{ 伏}^{-1} & n_i &= 1.4 \times 10^{-10} \text{ 厘米}^{-3} \\ m &= 10^{-21} \text{ 厘米}^{-4} & h &= 2 \times 10^{-7} \text{ 厘米}\end{aligned}$$

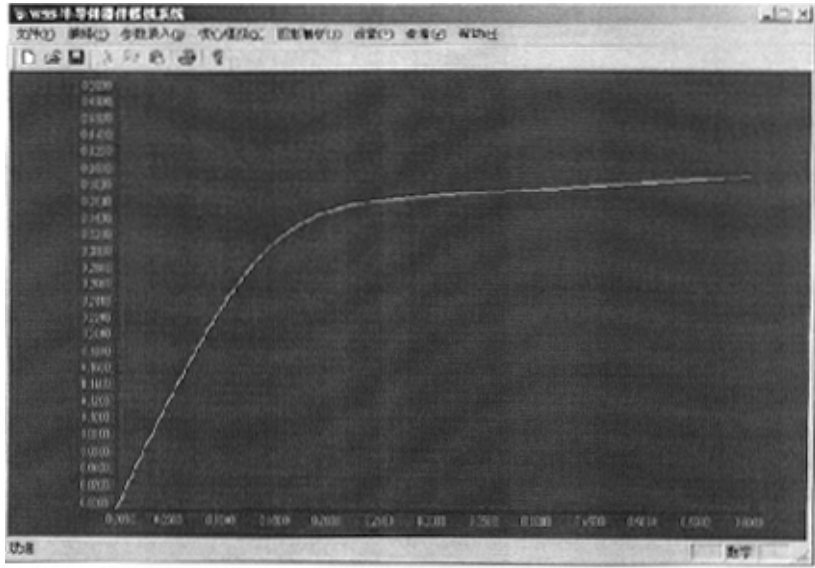


图 5.6 隐式方法迭代次数计算出来的电势

通过隐式积分的应用，我们只要经过 5 次牛顿迭代就可以得到一根理想的电势曲线。这样我们后面的分析都采用隐式积分。

### 5.3.2 基本二级管恢复过程模拟

在这一节里，将对一种微波功率限制器  $p-i-n$  二极管进行基本反向恢复过程的模拟。掺杂分布曲线为：

$$f(x) = -N_A e m_1 x^2 + N_B + N_D e^{-m_2 (w-x)^2}$$

$$\text{其中 } m_1 = \frac{1}{x_a^2} \ln\left(\frac{N_A}{N_B}\right) \quad m_2 = \frac{1}{x_b^2} \ln\left(\frac{N_D}{N_B}\right) \quad w = \text{总厚度}$$

中央  $n$  型区的厚度  $w_1 = 1$  微米，具有施主浓度  $N_B = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  的均匀掺杂。 $p$  型扩散层有表面浓度  $N_A = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  和厚度  $X_a = 2$  微米。右边的  $n$  型区扩散层有表面浓度  $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 。如图 5.6 所示：两边扩散层都是高斯分布，在对数坐标系上显示为抛物线分布。除了掺杂分布曲线外，电子和空穴的寿命为  $\tau_n = \tau_p = 20 \times 10^{-9}$  秒，二极管导电区截面积为  $1.257 \times 10^{-4} \text{ cm}^2$ 。

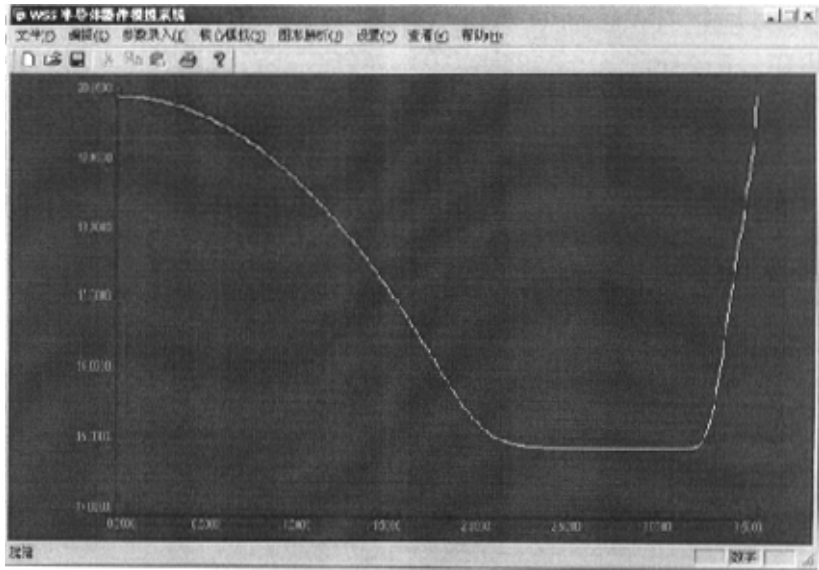


图 5.6  $p-i-n$  二极管掺杂分布

下面假设原先正向导通的二极管被突然方向偏置。相应地，二极管电流同时倒转其方向继续流动，直至内部储存的电子空穴全部消失。接着电流迅速衰减到某个关断状态。

基本电路图如图 5.7。其中正向电流，反向电压和串联电阻分别用  $I_F$ 、 $V_R$  和  $R_A$  表示。 $I_F = 0.1$  安培， $V_R = 10$  伏和  $R_A = 50$  欧姆：

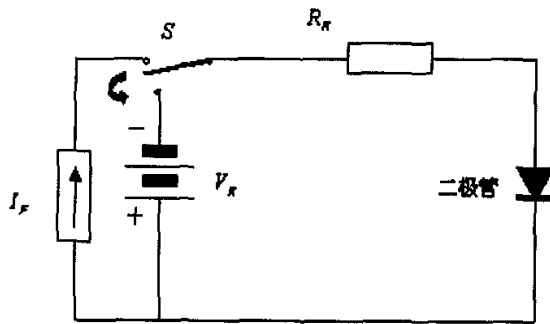


图 5.7 二极管反向恢复过程基本电路

### 5.3.2.1 反向过程的载流子分布

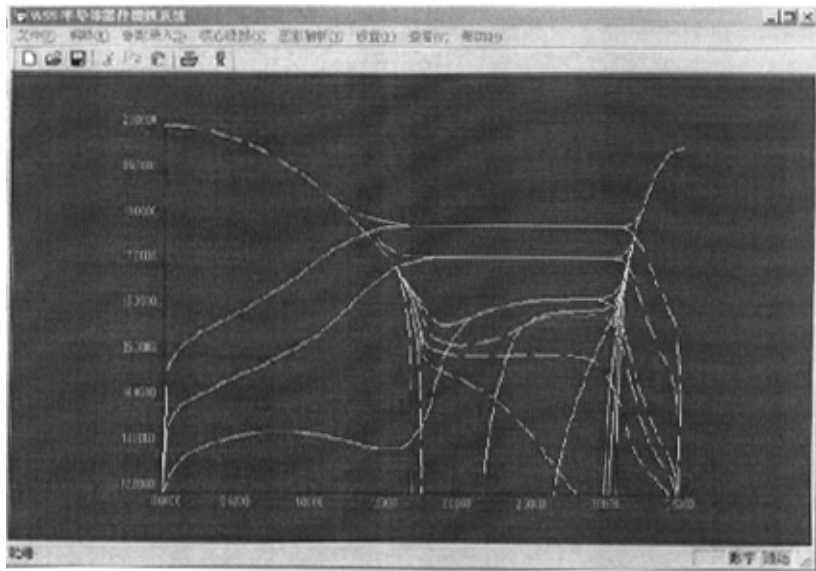


图 5.8 反向过程的载流子分布

### 5.3.2.2 方向过程的电场分布

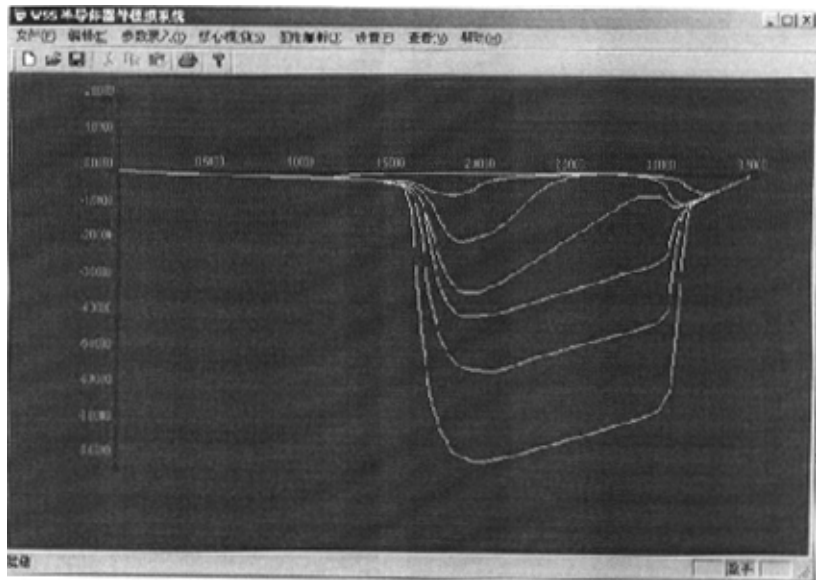


图 5.9 方向过程的电场分布



### 5.3.3 试验图形拟合

系统的图形解析器，不但本系统可以用，还可以做为试验数据的图形拟合之用，从试验中取得数据然后拟合成曲线。如图 5.10 所示

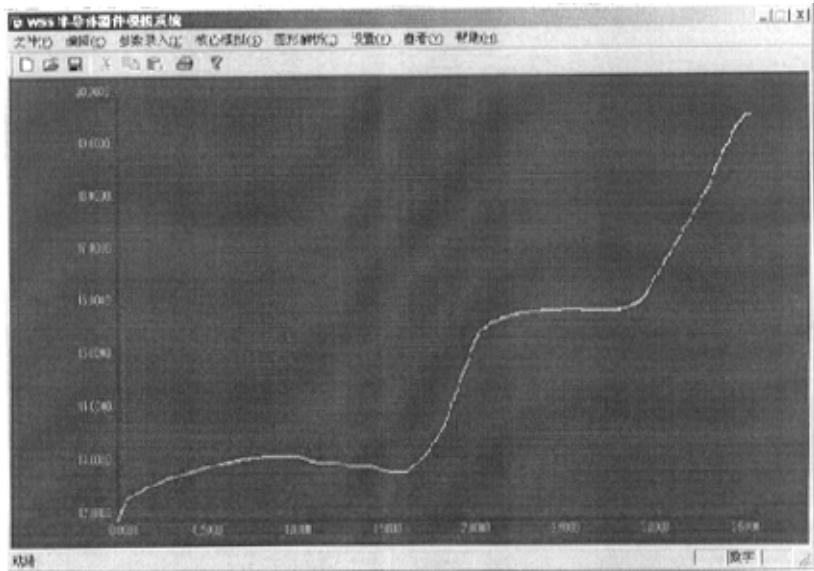


图 5.10 图形拟合

## 5.4 本章小结

本章介绍了器件模拟软件的各个主要部分的实现方法，并且在实际的 Demo 程序中运用了这些方法来实现了对一些基本器件的模拟工作，获得良好的效果，证明所用的模拟方法，软件的设计是完全可以复合要求的。

## 第六章 半导体器件模拟软件扩展

### 6.1 概述

一个优秀的软件系统，很重要的特征就是良好的可扩展性，这个扩展包括了功能的增加、系统的升级、以及功能代码的扩展复用。在本系统的设计中我们采用的是模块化的设计，这样做的好处是以随着技术的不断发展可以用新的模块取代原来的模块（参见图 6.1）。系统可以随着新模块不断取代旧的模块而趋于完善，并且从已有的模块可以建立新的应用。

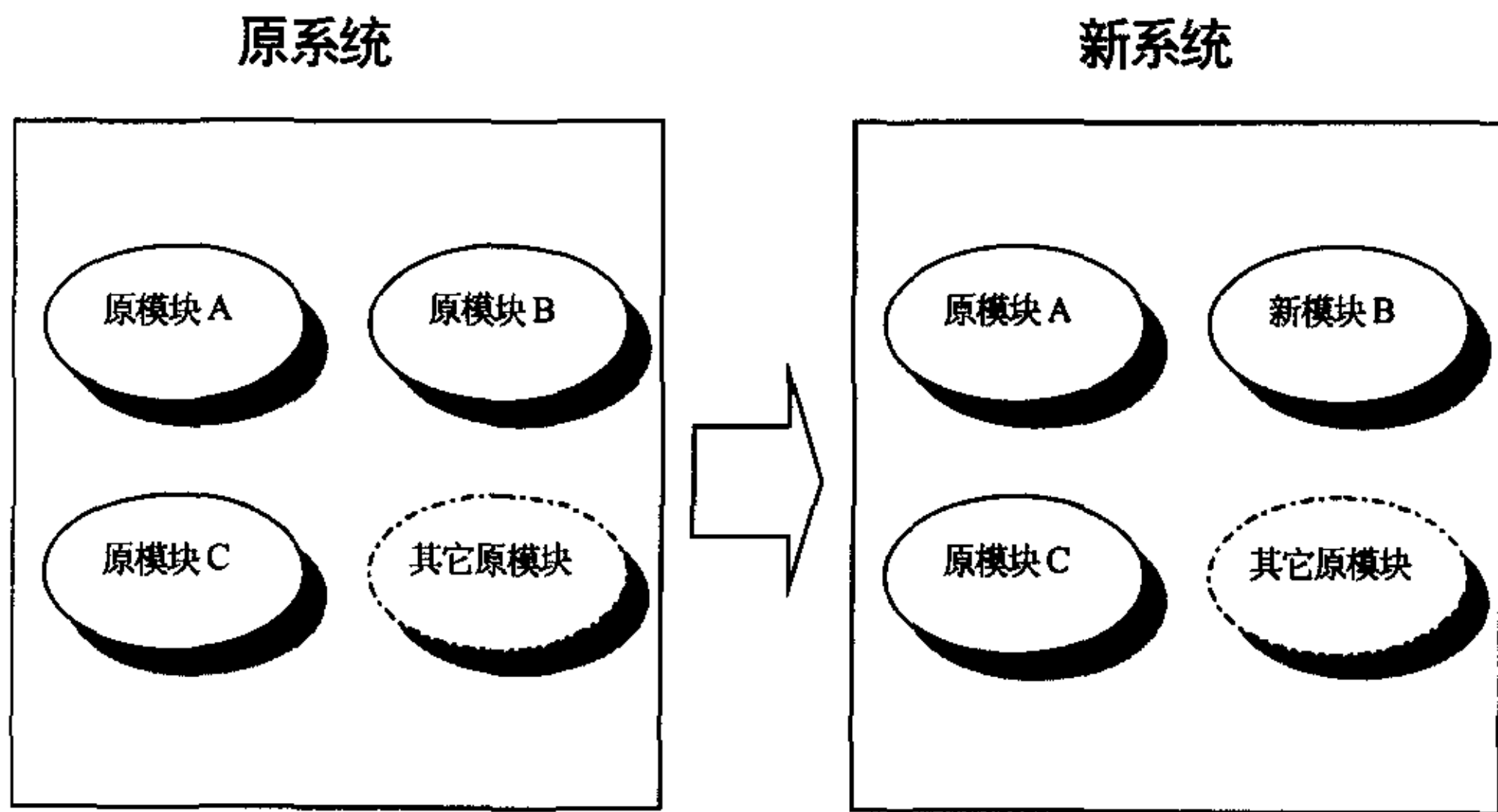


图 6.1 模块更新图

这样许多功能的扩展就可以缩小到模块的扩展。比如说我们如果要增加新的参数录入方式就只要更新参数录入模块，如果要增加功能就只要更新核心模拟模块，此外在每一个模块的设计中我们充分考虑了程序的扩展与移植问题。

### 6.2 系统功能扩展

#### 6.2.1 前台图形界面的扩展

由于前台界面的工作实质就是给通讯中间件提供已经定义好的参数，所以界面录入（无论是图形界面，还是文本录入）的功能主要就是两个部分：其一是获取符合要求的参数，另一个就是把参数传递给中间件。因此前台扩展很方便，可以用各种自

已熟悉的工具开发, 只要可以调用通讯中间件就可以。各种图形功能可以自己增加, 合乎习惯的方便的界面。如图 6.1 所示, 只要符合接口规范的前台图形界面都可以用来输入参数, 所以可以有两种的或者更多种的图形输入界面并行。

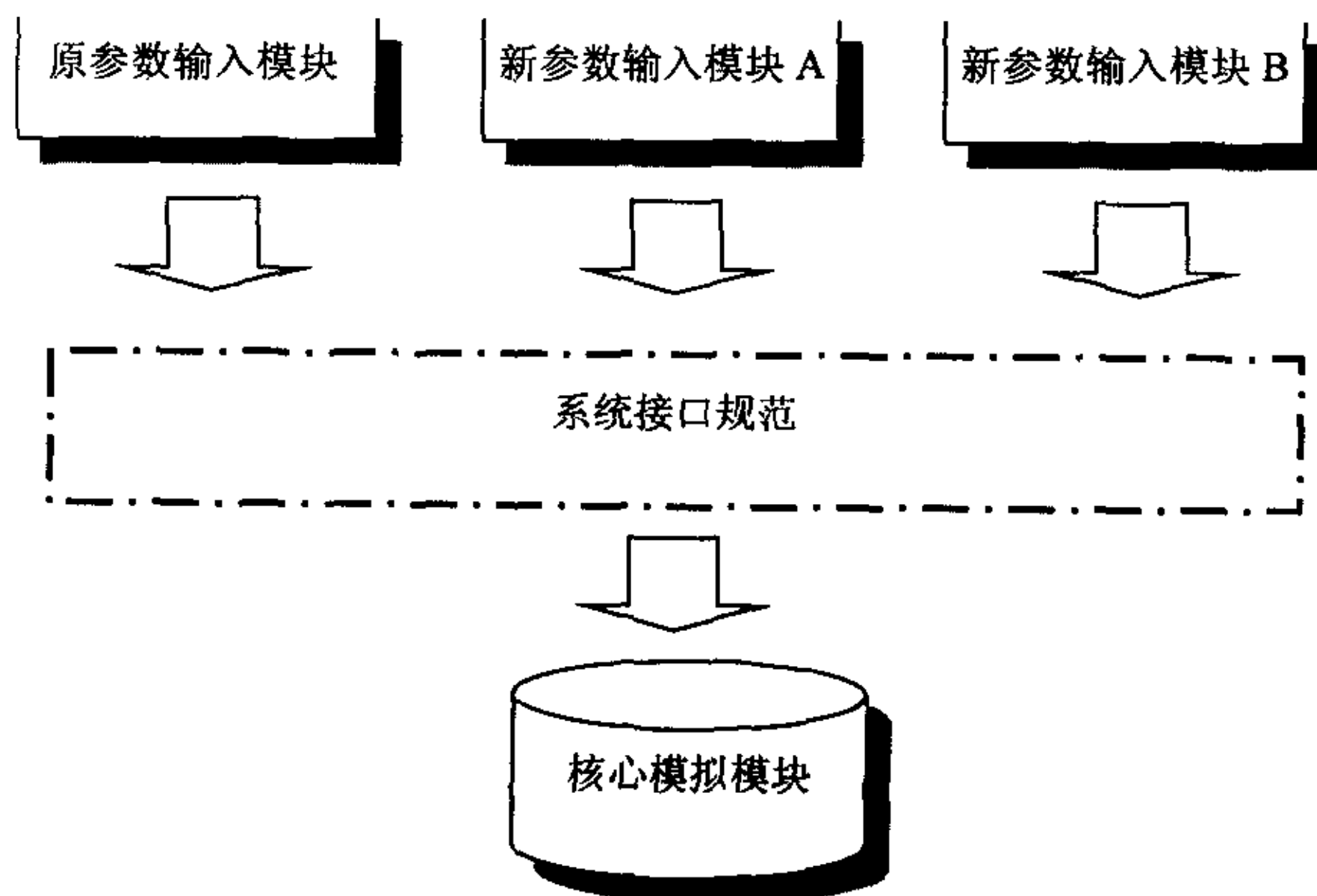


图 6.2 参数录入模块功能扩展示意图

旧的功能模块可以与新的功能模块并行运行, 相互之间没有影响。

### 6.2.2 核心模拟功能的扩展

核心模拟功能的扩展实质上是功能函数的扩展。每增添一个核心模拟功能, 就需要增加一个模拟函数, 同时接口协议中的功能模拟参数的定义也需要进行相应的扩展, 但是接口的处理是相同的, 所以核心模拟的功能扩展并不影响已有的系统的运行。核心模拟模块功能扩展示意图如图 6.3 所示。

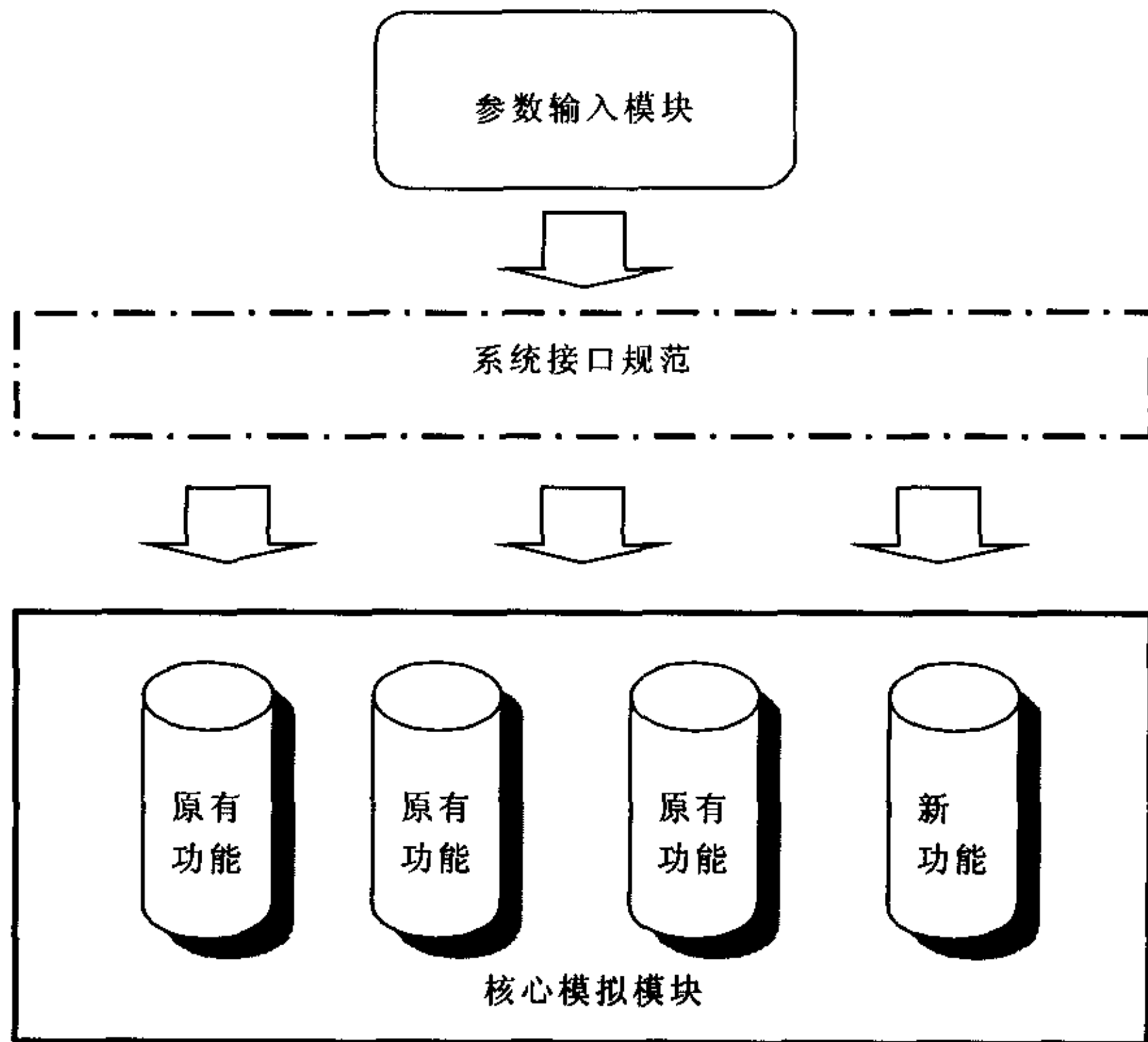


图 6.3 核心模拟模块功能扩展示意图

### 6.2.3 解析图形功能的扩展

图形解析模块的扩展与前台图形界面的扩展类似，图形解析的功能实质上就是根据核心模拟提供给中间件的输入计算结果解析出输出图形。所以只要是符合输出结果的数据都可以得到相应的扩展图形。解析图形模块的功能扩展的示意图如图 6.4 所示

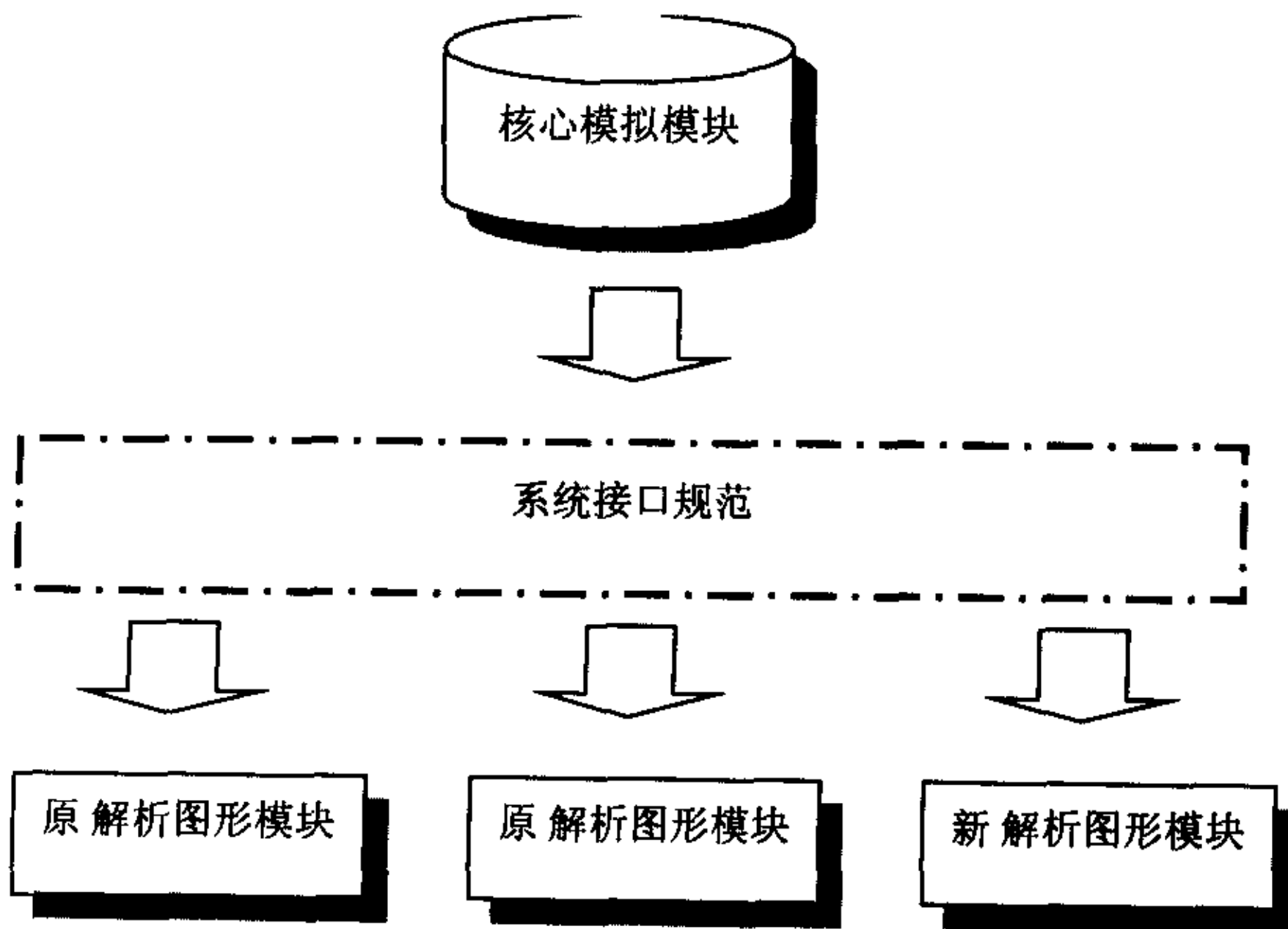


图 6.4 解析图形模块功能扩展示意图

### 6.3 本章小结

本章描述了系统三个部分的扩展情况。总的来说，本系统由于设计时充分考虑了扩展的接口功能，也因为器件模拟软件系统是一个系统工程，需要大量的人力物力来协同工作，而且是随着微电子技术的发展需要不断的发展更新的，所以这些扩展接口的设计也是十分必要的。

## 第七章 结束语

### 7.1 工作总结

对半导体器件的计算机模拟软件的设计与开发的研究是一项很有意义的工作，不仅加快了器件的研制开发节省了时间和资源，而且对实现计算机模拟软件的自主知识产权、我国器件开发的水平有很重要的现实意义。本文在系统性的描述了器件模拟的理论基础与技术架构的基础上，应用当今流行的软件设计模式对器件模拟软件进行了系统的分析设计，提出了器件模拟的分布式计算的三个功能模块（参数输入模块、核心模拟模块、结果输出模块）的结构，并且对每个功能模块的构架与实现做了设计与分析。在设计的基础上，经过部分代码的编写，完成了可以实现基本功能的器件模拟软件的 DEMO 版本，对半导体器件的基本单元二极管进行了模拟，证明了本文的设计方案无论从理论上还是从实际操作上都是完全可行的一种方案<sup>[39,40,41]</sup>。

系统的可扩展的架构方便了系统的功能增加与模块扩展，所以本文的模拟方法与设计很容易的应用于其它的 EDA 软件的设计工作中。

### 7.2 工作创新之处

本系统设计的最主要的创新之处在于：系统架构的三重结构模式以及器件分析软件的分布式计算的模式。

#### ● 功能模块的三重模式

本系统的三重模式：参数输入模块——核心模拟模块——结果输出模块的三重模式。把参数录入与核心模拟分开，可以方便参数录入端程序的改造，很方便的把录入界面修改成自己习惯的模式，也方便了参数录入方式的改进以及版本的转换，并且这些改变都不需要修改核心模拟以及输出模块。这样只要提供了核心模拟模块的接口，用户可以很方便的改造数据录入模块的界面，很容易实现多语言间的转换。

同理，结果输出界面跟其它两个部分分开，也可以方便图形的解析，界面的版本转换。

理论上，三个部分各自的升级或者修改，不影响其它两个模块的正常使用。实

现了系统模块间的松耦合。

- 服务器客户端的分布计算模式

本系统采用的服务器与瘦客户端的结构，可以实现多台客户机共享一台服务器。合理利用计算资源，把复杂的需要大量计算的器件模拟数值计算放在服务器上面，把计算量不大的参数输入以及图形解析放在客户端，最合理的利用了系统资源。

## 7.3 后续工作建议

### 7.3.1 工作切入点

由于器件系统软件的开发是个系统性的工作，本文所做的工作只是总体设计的一部分因此下接这做这个课题的同学可以从几个方面深入：

- 1、核心器件模拟算法的设计
- 2、器件模拟软件两个协议的制定与中间件的开发
- 3、一维、二维、三维器件模拟图形解析器的开发

这几个方面继续深入。在开发过程中的人力分配比例应该如下：按核心器件模拟、协议中间件开发、图形解析器开发的顺序人力分配比例为 3：1：1。

### 7.3.2 基本参考书籍

由于器件模拟的软件开发于设计是个系统性的工作，所需要的只是面比较广泛。不仅需要参加课题的同学有扎实的专业知识基础也要有很强的计算机软件开发设计能力。因此建议从事这个研究方向的同学在研究生一年级的時候，准备学习一些计算机方面的课程书籍：

- 数值分析
- 计算机图形学基础
- 数据结构与算法分析
- OpenGL 基础



## 参考文献

- [1]周如培,李恩琳等.现代科学的奇迹——半导体技术.微电子学,2001.4,第31卷第2期:23-26.
- [2]H.K.Gummel,IEEE Trans,Electron Devices,Vol.ED-11,1964,445.
- [3]A.Schiitz et al.,Dig.IEDM 1984,766.
- [4]J.J.H.Miller,An Introduction to the Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits, Boole Press,Dublin,Ireland,1981.
- [5]金湘亮.双极压控晶体管特性的理论建模及其计算机模拟分析:硕士学位论文.长沙:湖南大学应用物理系,2000.
- [6]李庆杨,王能超,易大义.数值分析.武汉:华中理工大学出版社,1982.
- [7]何野,魏同立.半导体器件的计算机模拟方法.北京:科学出版社,1989.
- [8]赵鸿麟.半导体器件计算机模拟[M].天津:天津大学出版社,1989,1-115.
- [9]冯康.数值计算方法.北京:国防工业出版社,1978.
- [10]H.L.Stone.SIAM J.Numer.Anal.,Vol.5,1968,No.3,530.
- [11]叶良修.小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟[M].北京:科学出版社,1996.1-100.
- [12]R.van.Overstraeten,H.DeMan,R.Mertens,Transport Equations in Heavily Doped Silicon.IEEE Transactions on Electron Devices,no.ED-20,March 1973,290-298.
- [13]M.S Mock,Transport Equations in Heavily Doped Silicon 16(1973):1251-1259.
- [14]李惠军.计算机辅助设计在电子技术领域的应用[M].东营:石油大学出版社,2000.
- [15]刘子建,黄红武,黄素华 et al.计算机图形处理原理与 CAD 应用技术[M],长沙:湖南科学技术出版社,1992.
- [16]仓田卫,半导体器件数值分析.上海:上海翻译出版社,1986.
- [17]A Nakagawa,One-Dimensional Device Model of the npn Bipolar Transistor Including Heavy Doping Effects under Fermi Statistics,Solid-State Electronics 22(1979):943-949.
- [18]D.L Scharfetter ,H.K.Gummel.Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator.IEEE Transactons on Electron Devices,no ED-16 January 1969,64-77.
- [19]D.U. von RosenBerg,Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations.New York:American Elsevier,1969

- [20]M.Kurata,Design.Considerations of Step Recover Diodes with the Aid of Numerical Large-Signal Analysis.IEEE Transactions on Electron Devices,no ED-19,Novemver 1972,1207-1215.
- [21]M.Kurata.A Computer Study of Power-Limiter Diode Behavior.Solid-State Electronics 17(1974),951-961.
- [22]李方保,李医民.矩阵论基础.南京:河海大学出版社,1999.
- [23]郑国详,罗永坚,杨文清 et al.MOSFET 中热载流子效应的计算、试验和模拟.固体电子学研究与进展,2001 2(25),182-191.
- [24]罗尹虹.MOSFET 电离辐射的二维数值模拟.固体电子学研究与进展,2001 3(25),339-344.
- [25]邢爱堂.深亚微米集成电路制造工艺设计与仿真系统 TSUPREM 发展与现状.电子元器件与材料,2001.8,33-34.
- [26]Roger S.Pressman.软件工程实践者的研究方法[M].北京:机械工业出版社,1999.
- [27]Kate Gregory.Visual C++6.0 开发使用手册.北京:机械工业出版社 1999.
- [28]陈元炎,邓宗明,张瑞哲. Visual C++6.0 编程实用技术与案例.北京:清华大学出版社,2001.
- [29]吴斌,段海波.OpenGL 编程权威指南[M].北京:中国电力出版社,2001.
- [30]向世明.OpenGL 编程与实例.北京:电子工业出版社,1999.
- [31]韩宝明,杜鹏,刘华 . Security And Payment Of E-Commerce . [n].北京:人民邮电出版社,2001.3,30-37
- [32]Netscape Communication Corp Kipp E.B.Hickman:The SSL Protocal.Feb,9<sup>th</sup>,1995
- [33]龚磊, 颜永红, 曾建平 et al.企业银行的基本安全策略.湖南大学学报(自然科学版) .2001,28(6):147-151
- [34]Donald Hearn,M.Pauline Baker.计算机图形学.北京:电子工业出版社,1998.
- [35]蔡启富.数学物理方程[M].武汉:武汉水利电力大学出版社,2000.
- [36]Baraff,A.Witkin.Dynamic Simulation of Non-Penetrating Flexible Bodies.in proceedings of SIGGRAPH'92,Computer Graphics,26(2):303-308.
- [37]Randy Abernethy.COM/DCOM 技术内幕.北京: 电子工业出版社 2000.
- [38]Dale Rogerson. COM 技术内幕(微软组件对象模型). 北京:清华大学出版社,1999.
- [39]刘泽东.UML 对象设计与编程.北京:希望电子出版社,2001.
- [40]Gamma.Desing Parterns:Elements of Reusable Object-Oriented Software.1995